

APLICAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA DE PARTÍCULAS DO AMBIENTE DE
SIMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS NO ESTUDO DE
MICROPROCESSOS DE COMINUIÇÃO

Narcés Jiménez Herrera

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Metalúrgica e de Materiais.

Orientador: Luís Marcelo Marques Tavares
Gabriel Kamilo Pantoja Barrios

Rio de Janeiro
Agosto de 2017

APLICAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA DE PARTÍCULAS DO AMBIENTE DE
SIMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS NO ESTUDO DE
MICROPROCESSOS DE COMINUIÇÃO

Narcés Jiménez Herrera

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA METALÚRGICA E DE MATERIAIS.

Examinada por:

Prof. Luís Marcelo Marques Tavares, Ph.D.

Prof. José Luis Drummond Alves, D.Sc.

Prof. Rodrigo Magalhães de Carvalho, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
AGOSTO DE 2017

Jiménez-Herrera, Narcés

Aplicação de modelos de quebra de partículas do ambiente de simulação do Método dos Elementos Discretos no estudo de microprocessos de cominuição/Narcés Jiménez Herrera. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XXIX, 193 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Luís Marcelo Marques Tavares

Gabriel Kamilo Pantoja Barrios

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 176 - 189.

1. Quebra de partículas. 2. Método dos Elementos Discretos. 3. Cominuição. I. Tavares, Luís Marcelo Marques *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais. III. Título.

Com amor para William, Miriam, Carlos, Laura, Sandra e Carlitos

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha mãe Miriam Herrera e o meu pai William Jiménez, pelo sacrifício realizado na sua vida por mim e apoiar sempre as minhas decisões, embora seja tão difícil.

Ao meu irmão Carlos e minhas irmãs Laura e Sandra, por acreditarem em mim, por existir e oferecer o seu amor e ajuda incondicional.

À minha namorada Eyleen, por ter estado continuamente comigo, me proporcionando tão valioso apoio e amor, por acreditar sempre em mim, me motivando constantemente, por suportar meu jeito e me oferecer sempre um sorriso.

À Juliana Segura pelo seu apoio incondicional, valiosa disposição, motivação e valioso compartilhar comigo.

Aos meus amigos do RJ, Gabriel e Sandra, e a todas as amigas e pessoas com quem compartilhei nos lugares em que morei: Vila UFRJ, Catete, Santo Amaro, São Cristóvão, Ilha do governador, Meier, Niterói, Bonsucesso e Ipanema.

À todas as pessoas que fizeram possível começar este grande processo: David Martinez, Angel Melendez, e em especial a Banessa Muñoz.

Aos meus orientadores, Luís Marcelo Marques Tavares e Gabriel Kamilo Pantoja Barrios, pelo apoio e orientação.

À Universidade Federal do Rio de Janeiro, principalmente ao Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais e ao Laboratório de Tecnologia Mineral.

À CNPq pela bolsa de estudos para a realização do mestrado no PEMM/COPPE.

À ESSS pelo fornecimento da licença do Rocky para a presente investigação.

À DEM Solutions pelo apoio através do Academic Partner Programme.

Finalmente, agradeço aos colegas do Laboratório de Tecnologia Mineral, em especial aqueles com quem mais compartilhei: Anderson, Mateus, Tulio, Raphael, Victor e Wesley.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

APLICAÇÃO DE MODELOS DE QUEBRA DE PARTÍCULAS DO AMBIENTE DE
SIMULAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS NO ESTUDO DE
MICROPROCESSOS DE COMINUIÇÃO

Narcés Jimenez Herrera

Agosto/2017

Orientador: Luís Marcelo Marques Tavares

Gabriel Kamilo Pantoja Barrios

Programa: Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Neste trabalho foram estudados um dos microprocessos de cominuição usando três modelos de quebra de partículas dentro do ambiente de simulação DEM: O modelo de ligação de elementos – BPM, o modelo de elementos tetraédricos – FBM e o modelo de substituição de elementos – PRM. Tais modelos foram calibrados com na base da energia média de fratura de partículas individuais. Foram evidenciados o potencial e as limitações destas ferramentas para descrever a quebra por impacto de partículas em leitos não confinados, a qual é a condição de aplicação de esforços encontrada em moinhos de bolas. Em geral, o BPM apresentou alta resolução na descrição da massa quebrada e do raio de captura de partículas no leito. No entanto, a fraca aderência da distribuição de tamanhos à experimental mostra a necessidade de melhorar o modelo. O PRM mostrou algum potencial na descrição da massa quebrada e captura de partículas, e boa aderência com a distribuição de tamanhos experimental. O FBM demonstrou potencial na descrição da probabilidade de fratura de partículas e o parâmetro t_{10} , embora, de forma não simultânea. Aliás, neste último ainda mostrou algum potencial na descrição da massa quebrada e captura de partículas, embora fraca capacidade de descrever as distribuições de tamanhos experimentais.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

APPLICATION OF PARTICLE BREAKAGE MODELS IN DISCRETE ELEMENT
METHOD SIMULATION IN THE STUDY OF COMMINUTION
MICROPROCESSES

Narcés Jiménez Herrera

August/2017

Advisor: Luís Marcelo Marques Tavares

Gabriel Kamilo Pantoja Barrios

Department: Metallurgy and Materials Engineering

In this work one of the comminution microprocesses were studied using three particle breakage models within the DEM simulation environment: The Bonded Particle Model – BPM, the Fast Breakage Model - FBM, and the Particle Replacement Model – PRM. Such models were calibrated on the basis of the median fracture energy of individual particles. The potential of these tools to describe comminution was demonstrated through validation using virtual experiments of impact breakage of unconfined particle beds. They showed that the BPM presents higher resolution in the description of effects as the broken mass and particle capture radius on the bed. However, the poor adherence between experimental and simulated product size distribution suggest the need to improve the model to obtain a better representation of this effect. The PRM demonstrated some potential in the description of broken mass and particle capture, and higher adherence between experimental and simulated product size distribution. The FBM demonstrated potential in the description of both the breakage probability and the t_{10} parameter of particles, but in a non-simultaneous way. The latter also demonstrated some potential in the description of broken mass and particle capture, and poor resolution in the description of experimental product size distributions.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	OBJETIVO GERAL	4
1.1.1	OBJETIVOS ESPECIFICOS	4
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
2.1	DESCRIÇÃO FÍSICA DA FRATURA	6
2.1.1	Teoria da fratura do Griffith	7
2.1.2	Microestrutura e fratura	9
2.2	MICROPROCESSOS DA QUEBRA DE PARTÍCULAS	11
2.2.1	Classificação dos tipos de carregamento de partículas	13
2.2.2	Caracterização de partículas individuais.....	14
2.2.2.1	Ensaio de impacto simples	15
2.2.2.2	Ensaio de impactos duplos	16
2.2.2.3	Ensaio de compressão	17
2.2.3	Modelagem da quebra de partículas individuais.....	17
2.2.3.1	Modelagem da probabilidade de quebra e energia de fratura de partículas individuais.....	17
2.2.3.2	Modelagem da fragmentação de partículas individuais.....	20
2.2.4	Quebra de leitos de partículas.....	23
2.2.4.1	Modelagem da quebra de leitos de partículas	23
2.3	MODELAGEM DA QUEBRA DE PARTÍCULAS USANDO DEM	26
2.3.1	Método dos Elementos Discretos	27
2.3.1.1	Modelos de contato usados em DEM	28
2.3.1.2	Modelo de Hertz - Mindlin.....	28
2.3.1.3	Modelo de contato elasto-plástico	31
2.3.2	Modelos de quebra de partículas em DEM.....	33
2.3.2.1	Modelo de ligação de elementos.....	35
2.3.2.2	Modelos de elementos tetraédricos.....	38
2.3.2.3	Modelo de substituição de elementos	41
2.3.3	Aplicações dos modelos DEM de quebra de partículas na cominuição	44
2.3.3.1	Aplicações do modelo de ligações de elementos na cominuição.....	45
2.3.3.2	Aplicações do modelo de elementos tetraédricos na cominuição	50
2.3.3.3	Aplicações do modelo de substituição de elementos na cominuição	54
2.3.4	Caracterização de parâmetros DEM	62
2.3.4.1	Parâmetros DEM das propriedades individuais e de contato dos materiais	62
2.3.4.2	Parâmetros DEM dos modelos de quebra.....	65
3	MATERIAIS E METODOLOGIA.....	67
3.1	MATERIAIS	67
3.2	CARACTERIZAÇÃO EXPERIMENTAL	68
3.2.1	Experimentos de quebra de partículas por compressão	68

3.2.2	Caracterização de parâmetros de quebra.....	70
3.2.3	Quebra de leitos de partículas.....	71
3.2.4	Caracterização de parâmetros DEM	72
3.2.4.1	Caracterização de propriedades individuais.....	72
3.2.4.2	Caracterização dos parâmetros de contato.....	73
3.2.4.3	Caracterização do formato de partícula	75
3.2.5	Softwares de simulação baseados no Métodos dos Elementos Discretos	75
3.2.5.1	Pós-processamento de informações com os modelos de quebra do ambiente DEM.....	79
4	MODELAGEM	80
4.1	MODELAGEM DA QUEBRA DE PARTÍCULAS INDIVIDUAIS NO AMBIENTE DE SIMULAÇÃO DEM	80
4.1.1	Modelo de ligação de elementos - BPM.....	80
4.1.1.1	Distribuição de tamanho de esferas da metapartícula	82
4.1.1.2	Criação de aglomerados de esferas.....	85
4.1.2	Modelo de elementos tetraédricos - FBM.....	90
4.1.2.1	Modelagem do formato das partículas.....	91
4.1.2.2	Calibração do FBM	92
4.1.3	Modelo de substituição de elementos - PRM	94
4.1.3.1	Modelagem do PRM.....	95
4.1.3.2	Calibração do PRM	97
4.2	MODELAGEM DA QUEBRA DE LEITOS DE PARTÍCULAS NO AMBIENTE DE SIMULAÇÃO DEM	98
4.2.1	Modelagem de leitos de partículas no modelo BPM	101
4.2.2	Modelagem de leitos de partículas no modelo FBM	105
4.2.3	Modelagem de leitos de partículas no modelo PRM	106
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	108
5.1	CARACTERIZAÇÃO DO MATERIAL MODELO108	
5.1.1	Parâmetros dos materiais	110
5.1.2	Parâmetros dos modelos de quebra DEM.....	112
5.1.2.1	Parâmetros do modelo BPM.....	112
5.1.2.2	Parâmetros do modelo FBM.....	113
5.1.2.3	Parâmetros do modelo PRM.....	113
5.2	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS MODELOS DE QUEBRA	115
5.2.1	Análise de sensibilidade do BPM	115
5.2.1.1	Definição de parâmetros do modelo	115
5.2.1.2	Probabilidade de quebra da partícula individual.....	116
5.2.1.3	Efeito da energia aplicada na quebra de partículas individuais.....	118
5.2.1.4	Efeito do tamanho da partícula individual.....	121
5.2.1.5	Quebra de leitos de partículas.....	121
5.2.2	Análise de sensibilidade do FBM	132

5.2.2.1	Raio de Captura	133
5.2.2.2	Massa quebrada	135
5.2.2.3	Fragmentação de leitos de partículas	137
5.2.3	Análise de sensibilidade do PRM	139
5.2.3.1	Raio de Captura	140
5.2.3.2	Massa quebrada	142
5.2.3.3	Fragmentação do leito de partículas	144
5.3	CALIBRAÇÃO E VALIDAÇÃO DOS MODELOS DE QUEBRA	146
5.3.1	Calibração de parâmetros	146
5.3.1.1	Calibração dos parâmetros de contato usando o ângulo de repouso	147
5.3.1.2	Calibração do modelo BPM	148
5.3.1.3	Calibração do modelo FBM	153
5.3.1.4	Calibração do modelo PRM	159
5.3.2	Validação	162
5.3.2.1	Raio de captura	163
5.3.2.2	Massa quebrada	164
5.3.2.3	Fragmentação de leitos de partículas	165
5.4	PROPOSTA CONCEITUAL PARA MODELO DE QUEBRA AVANÇADO DO PRM	168
5.4.1	Padrões de fragmentação	170
6	CONCLUSÕES	174
ANEXO A	190
ANEXO B	192

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. Microprocessos de cominuição no moinho de bolas: (1) Abrasão de bolas sobre leito de partículas; (2) Impacto de um leito de partículas com bola.	2
Figura 2.1. Tipo de ruptura de acordo ao esforço aplicado: esforço normal (esquerda) esforço cisalhante (direita).	7
Figura 2.2. Descrição da falha sobre esforços de tração.	8
Figura 2.3. Esforços de tração causados pela aplicação da compressão.	9
Figura 2.4. Ensaio em Célula de Carga de Impacto representando o perfil força-tempo. (Fonte: Dados históricos do LTM).	12
Figura 2.5. Produto de um ensaio de queda de peso (DWT) para diferentes energias aplicadas. (Fonte: Dados históricos do LTM).	13
Figura 2.6. Classificação dos leitos de partículas dentro do ambiente de cominuição, sendo d_i o diâmetro ou tamanho da partícula individual; $d_{p,max}$ o diâmetro da maior partícula do leito, h_l a altura do leito de partículas; e Di o diâmetro do leito de partículas. (modificado de: BARRIOS, 2015).	14
Figura 2.7. Diferentes tipos de ensaios de quebra de partículas individuais.	15
Figura 2.8. Distribuição acumulada de energias de fratura para amostra de minério de cobre de Sossego na faixa de 9,5 x 6,3 mm. Comparação entre dados experimentais e o modelo de TAVARES e KING (1998).	18
Figura 2.9. Quebra por clivagem de partícula de minério em compressão uniaxial	20
Figura 2.10. Relação entre t_{10} e t_n para um minério de cobre. Os símbolos representam os dados calculados e as linhas o ajuste usando a função beta incompleta (TAVARES, 2007)	22
Figura 2.11. Ilustração das variáveis r_e e r_g (BARRIOS <i>et al.</i> , 2011).	25
Figura 2.12. Ilustração das forças atuando sobre a partícula i pela partícula j	28
Figura 2.13. Ilustração simplificada do modelo de contato Hertz-Mindlin com escorregamento	29
Figura 2.14. Ilustração da relação força – deslocamento para o modelo de histerese linear dado para a componente normal da força.	32
Figura 2.15. Esquema representando as diferentes técnicas de quebra de partículas baseadas em DEM (BARRIOS, 2015).	35
Figura 2.16. Esforço de partícula (aglomerado de esferas cimentadas com ligações) do BPM com força igual à força crítica de fratura.	36

Figura 2.17. Ilustração das componentes de esforço atuando sobre a ligação que une duas esferas i e j no modelo de ligação de elementos.	36
Figura 2.18. Representação em duas dimensões do esforço de partícula do modelo de elementos tetraédricos em duas dimensões (triângulos elementares) com força igual à crítica de fratura e a fragmentação resultante.	39
Figura 2.19. Ilustração do modelo de substituição de elementos usando no Método dos Elementos Discretos – DEM.	42
Figura 2.20. Esquema das versões V2 e V3 do modelo de substituição de elementos disponível como API no software EDEM. Adaptado de BARRIOS (2015).....	44
Figura 2.21. Área da seção transversal de bola de concreto modelada com diferentes materiais identificados com números (esquerda). Resultado do impacto de bola contra diferentes alvos: a, b, c, d (direita). Fonte: SCHUBERT <i>et al.</i> (2005).....	46
Figura 2.22. Resultados de laboratório e DEM de compressão de um arranjo de partículas. Fonte: AFSHAR <i>et al.</i> (2017).	47
Figura 2.23. Processo de quebra de partículas num britador de impacto de eixo vertical: Partícula depois do impacto contra o impulsor (esquerda). Partícula depois do impacto contra a bigorna (direita). Fonte: DJORDJEVIC <i>et al.</i> (2003).....	48
Figura 2.24. Progresso de fratura sequencial de esfera de calcário em britador de mandíbula (esquerda) e modelo DEM em uma etapa intermedia de britagem, vista de cima (direita). Fonte: REFAHI <i>et al.</i> (2010).	49
Figura 2.25. Simulação de seção de britador cônico com partículas do BPM. Fonte: QUIST e EVERTSSON (2016).....	50
Figura 2.26. Processo de quebra de partícula modelada com modelo de elementos tetraédricos. Fonte: POTAPOV e CAMPBELL (1996)	51
Figura 2.27. Simulação de impacto de leitos de partículas não confinados usando o modelo de elementos tetraédricos. Fonte: POTAPOV e CAMPBELL (2000).	52
Figura 2.28. Sequência de fragmentação de partícula individual com formato (esquerda). Distribuição de fragmentos depois do carregamento de leitos de partículas esféricas confinadas (direita). Fonte: PALUSZNY <i>et al.</i> (2015).....	53
Figura 2.29. Simulação da quebra em britador cônico usando modelo de elementos tetraédricos. Fonte: LICHTER <i>et al.</i> (2009).....	54

Figura 2.30. Distribuição de fragmentos resultantes após o carregamento: modo 1, progênie conformada por dois fragmentos (esquerda). modo 2, progênie com 12 fragmentos (direita). Fonte: ÅSTRÖM e HERRMANN (1998).	55
Figura 2.31. Ilustração de mecanismo de quebra no PRM: (a) quebra de partícula individual com o PRM. (b) quebra de leito de partículas esféricas confinadas. Fonte: CIL e BUSCARNERA (2016).	56
Figura 2.32. Simplificação 2D mostrando a criação de novas ligações depois da fratura de uma partícula (esquerda). Ilustração das ligações intactas depois de aplicar pressões verticais sobre duas diferentes amostras cimentadas: (a) e (b) (direita). Fonte: DE BONO e MCDOWELL (2014).	57
Figura 2.33. Simulação da quebra de partículas na prensa de rolos – HPGR. Fonte: BARRIOS e TAVARES (2016).	58
Figura 2.34. Simulação da quebra de partículas num britador cônico (direita). Exemplo de uma da distribuição de fragmentos (progênie) modelada para uso com o PRM (esquerda). Fonte: DELANEY <i>et al.</i> (2015).	59
Figura 2.35. Padrão de distribuição de esforço sobre a área das partículas e geometria (esquerda) Processo de quebra de leito de partículas confinado (direita) (Fonte: KOU <i>et al.</i> (2001)).	61
Figura 2.36. Ilustração de medida do modulo de Young num material. F é a força aplicada, A' é a área, Δl_x é o deslocamento, $l_{x,0}$ o comprimento inicial.	62
Figura 2.37. Ilustração de medida do módulo de cisalhamento num material. F é a força, A' é a área, Δl_y é o deslocamento, $l_{x,0}$ é o comprimento inicial da amostra, e θ_y é o ângulo de deslocamento.	63
Figura 2.38. Ilustração de medida do modulo de Poisson. F é a força, A' é a área, Δl_y é o deslocamento lateral, $l_{y,0}$ é a largura inicial da amostra, e Δl_x é o deslocamento axial, e $l_{x,0}$ o comprimento inicial da amostra.	64
Figura 3.1. Partícula do minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm.	67
Figura 3.2. Arranjos de leitos de monocamada de partículas de minério de cobre de Sossego na faixa de 9,5x6,3 mm.	68
Figura 3.3. Equipamento de compressão uniaxial EMIC. DL 1000 (esquerda) e superfície da bigorna contendo os fragmentos de uma partícula (direita).	69
Figura 3.4. Célula de carga de impacto de 63 mm com acessórios para o ensaio de quebra de leitos por impacto com bola.	71

Figura 3.5. Sistema de scanner 3D.	75
Figura 3.6. Interface de simulação do software EDEM com esquema de ensaio na CCI.	77
Figura 3.7. Interface de simulação do software Rocky com esquema de ensaio na CCI.	77
Figura 4.1. Processo de modelagem de uma metapartícula no EDEM: (a) importação do formato 3D da partícula real em formato STL, (b) preenchimento da geometria 3D com uma dada distribuição de esferas, (c) criação das ligações entre as esferas com parâmetros calibrados	81
Figura 4.2. Distribuições de esferas no empacotamento de metapartículas.	83
Figura 4.3. Processo de criação do aglomerado de partículas que conforma a metapartícula.	86
Figura 4.4. Metodologias de construção de metapartículas usando API no EDEM	86
Figura 4.5. Processo de substituição de elementos para partícula individual usando API.	87
Figura 4.6. Partícula de minério de cobre modelada no Rocky.....	91
Figura 4.7. Modelagem da distribuição de tamanhos de fratura primária no PRM.	97
Figura 4.8. Impacto em leito de monocamada.	99
Figura 4.9. Ilustração do empacotamento denso de esferas por anéis.	99
Figura 4.10. Ilustração de empacotamento denso por camadas.	100
Figura 4.11. Ilustração da sequência de empilhamento entre camadas.	100
Figura 4.12. Ponto de referência do leito $q=0$ para localização das metapartículas.....	102
Figura 4.13. Algoritmo para locação de metapartículas num arranjo.	103
Figura 4.14. Processo de substituição de elementos para leitos de partículas usando API.	103
Figura 4.15. Processo usado na aproximação dos aglomerados no software EDEM previamente ao impacto em leitos.	104
Figura 5.1. Amostra representativa de perfis esforço-deformação de ensaios de quebra de partículas individuais de 9,5 x 6,3 mm em compressão uniaxial.	108
Figura 5.2. Distribuição de forças de fratura (esquerda) e de energias de fratura (direita) de partículas de minério de cobre de Sossego (9,5 x 6,3 mm) por compressão... ..	109
Figura 5.3. Partícula individual ID61 submetida a compressão uniaxial: Partícula sem fraturar (esquerda), fragmentos após a quebra (direita).	109

Figura 5.4. Distribuição da quebra primária de cem partículas individuais de 9,5 x 6,3 mm do minério de cobre de Sossego, fraturadas por compressão uniaxial.....	110
Figura 5.5. Comparação do perfil esforço deformação simulado com diferentes perfis esforço-deformação experimentais para o minério de cobre de Sossego.....	115
Figura 5.6. Comparação da função de probabilidade de fratura entre a simulação e o modelo analítico de TAVARES e KING (1998).....	117
Figura 5.7. Efeito da orientação do carregamento num ensaio virtual de compressão sobre uma metapartícula individual.....	118
Figura 5.8. Efeito da energia aplicada sobre a quebra (número de ligações quebradas).	119
Figura 5.9. Efeito dos impactos repetidos sobre o enfraquecimento das metapartículas.	119
Figura 5.10. Impacto simples de uma partícula individual em três energias de diferentes magnitudes. Razão de dano resultante (esquerda). Função quebra resultante num evento simples de quebra (direita).....	120
Figura 5.11. Perfil esforço-deformação para metapartículas em duas escalas de tamanho diferentes, usando os mesmos parâmetros.....	121
Figura 5.12. Sequência de impacto sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo BPM – Software EDEM).....	122
Figura 5.13. Ilustração do incremento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis (Modelo BPM - software EDEM).	123
Figura 5.14. Raio de captura de partículas com duas resistências médias de fratura, dispostas em monocamada (três anéis de partículas). Impacto em três energias usando bola de aço de 88 mm de diâmetro (Modelo BPM).	123
Figura 5.15. Pontos de esforço compressivo de partículas com resistência média de fratura de 0,42 J, dispostas em monocamada (3 anéis). Impacto com energia de 1,5 J usando uma bola de 88 mm de diâmetro. Máxima captura atingida pela bola. (BPM).	124
Figura 5.16. Captura de partículas com energia média de fratura de 0,42 J dispostas em monocamadas (três anéis de partículas), usando bolas de 40 e 88 mm de diâmetro (BPM).	124

Figura 5.17. Penetração máxima atingida por bola de 88 mm de diâmetro em leitos de partículas de diferentes camadas. A energia de impacto usada foi 1,5 Joules sobre partículas virtuais com resistência média de fratura de 0,42 J (Modelo BPM - Software EDEM).	126
Figura 5.18. Comparação da massa quebrada em diferentes configurações de arranjos de partículas. Curvas simuladas para em diferentes energias de impacto usando impactor esférico de 88 mm de diâmetro (BPM).	127
Figura 5.19. Efeito da resistência das partículas sobre a massa quebrada em impactos de 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro (BPM).	127
Figura 5.20. Efeito do tamanho da bola de impacto sobre a massa quebrada em leito em monocamada com três anéis de partículas (BPM).....	128
Figura 5.21. Distribuição granulométrica dos produtos dos impactos com bola de 88 mm sobre arranjos de partículas em diferentes configurações (BPM).	129
Figura 5.22. Fragmentação em eventos de impacto usando bolas de diâmetros diferentes com duas energias aplicadas: distribuição de tamanhos do produto (esquerda); função quebra (direita) (BPM).	130
Figura 5.23. Razão de dano no impacto de um arranjo de partículas com três anéis usando bolas de 40 e 88 mm de diâmetro em três energias de diferentes magnitudes (BPM).	131
Figura 5.24. Comparação entre as funções quebra simulada resultante em impactos de leitos de partículas compostos por partículas com diferentes energias médias de fratura em cada caso (BPM).	132
Figura 5.25. Sequência de impacto com bola sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo FBM - software Rocky).	133
Figura 5.26. Ilustração do aumento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis, usando bola de 88 mm de diâmetro. Escala de cores correspondente com a região de esforço aplicada, resultando na quebra de algumas partículas (Modelo FBM – <i>software</i> ROCKY).	134
Figura 5.27. Captura de partículas dispostas em monocamadas com três anéis, usando bola de 88 e 40 mm de diâmetro (FBM).	134
Figura 5.28. Ilustração da penetração máxima da bola em leitos de partículas de diferentes camadas, energia de impacto de 3,0 Joules (software Rocky).....	135

Figura 5.29. Ilustração do aumento da massa quebrada em um leito de partículas de quatro anéis devido ao impacto com uma bola de 88 mm de diâmetro com duas energias. Escala de cores correspondente ao tamanho de partícula final (FBM).	136
Figura 5.30. Massa quebrada em leitos de partículas de diferentes configurações usando impacto em três energias com bola de 88 mm de diâmetro (FBM).	136
Figura 5.31. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 e 40 mm de diâmetro sobre um leito de 3 anéis de partículas (FBM).	137
Figura 5.32. Distribuição do produto da quebra por impacto com bola de 88 mm para arranjos de partículas com diferentes configurações: arranjos com diferente número de anéis (esquerda); arranjos com diferente número de camadas (direita) (FBM).	137
Figura 5.33. Distribuição de tamanhos do produto da quebra em eventos de impacto usando bolas de diferentes diâmetros sobre um leito de partículas de três anéis (FBM).	138
Figura 5.34. Função quebra em eventos de impacto com duas energias usando bolas de diferente diâmetro sobre leitos em monocamada de três anéis de partículas (FBM).	139
Figura 5.35. Sequência de impacto sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo PRM – software EDEM).	139
Figura 5.36. Ilustração do incremento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis (Modelo PRM – software EDM).	140
Figura 5.37. Raio de captura de partículas com duas resistências médias dispostas em monocamada (três anéis de partículas). Impacto em três energias usando bola de 88 mm de diâmetro (PRM).	140
Figura 5.38. Raio de captura de partículas com energia média de fratura de 0,02 J dispostas em monocamada (três anéis de partículas), usando bolas de diferentes diâmetros (PRM).	141
Figura 5.39. Penetração máxima de bola de 88 mm de diâmetro em leitos de partículas de diferentes camadas. A energia de impacto usada foi 1,5 Joules (Modelo PRM - software EDEM).	141

Figura 5.40. Ilustração da massa quebrada com o incremento da energia aplicada sobre leito em monocamada (Modelo PRM - software EDEM). As diferentes cores ilustram o tamanho das esferas.....	143
Figura 5.41. Massa quebrada em arranjos de partículas de diferentes configurações usando impactos de três energias com bola de 88 mm de diâmetro (PRM).....	143
Figura 5.42. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 e 40 mm de diâmetros sobre leito em monocamada de três anéis de partículas (PRM).....	144
Figura 5.43. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 mm sobre um leito em monocamada com três anéis de partículas. Casos usando partículas com energia média de fratura diferente (PRM).....	144
Figura 5.44 Distribuição granulométrica resultante em eventos de impacto com bola de 88 mm de diâmetro sobre arranjos de partículas de diferentes configurações (PRM).....	145
Figura 5.45. Função quebra resultante do impacto de leito em monocamada de três anéis usando bolas de diferente diâmetro (PRM).	145
Figura 5.46. Efeito da energia média de fratura de partículas sobre a função quebra resultante em impactos. Bola de 88 mm de diâmetro (PRM).....	146
Figura 5.47. Comparação do ângulo de repouso experimental com ângulos de repouso finais nos modelos PRM, FBM e BPM.	148
Figura 5.48. Gráfico normal dos efeitos padronizados para a energia de fratura ($\alpha = 0,05$).	149
Figura 5.49. Efeitos principais padronizados para a energia de fratura.	150
Figura 5.50. Superfície de resposta da energia de fratura na variação dos parâmetros τ_{bs}/σ_{bn} e τ_{bs} (esquerda) e parâmetros k_{bn}/k_{bs} e k_{bn} (direita).	150
Figura 5.51. Efeitos principais padronizados para a percentagem acumulada e ligações quebradas até a fratura.	151
Figura 5.52. Comparação do perfil esforço-deformação experimental e simulado: partícula com energia média de fratura de 0,15 Joules.....	152
Figura 5.53. Fratura por clivagem de metapartícula no experimento virtual de compressão.	152
Figura 5.54. Perfil força–tempo simulado e número de ligações quebradas – tempo de partícula individual calibrada virtualmente (BPM).	153

Figura 5.55. Comparação de perfis esforço-deformação obtidas em diferentes velocidades de compressão (BPM).....	153
Figura 5.56. Funções de probabilidade de quebra de partículas: Curva do modelo teórico do software Rocky, curva do modelo analítico do TAVARES e KING (1998), pontos simulados e dados experimentais.....	154
Figura 5.57. Cenário de simulação usado para a calibração do modelo: Fratura de múltiplas partículas individuais de 4,57 mm usando bola de 40 mm de diâmetro.	155
Figura 5.58. Funções para descrever o t_{10} : Curva do modelo do software Rocky 3.11, Modelo de TAVARES (2004), pontos simulados, e pontos experimentais.	155
Figura 5.59. Equivalências de modelos quando é realizada a calibração do t_{10}	156
Figura 5.60. Função quebra no impacto de partícula individual usando bola com 88 mm de diâmetro: distribuição experimental, distribuição simulada em diferentes energias aplicadas (FBM).....	157
Figura 5.61. Cenário de compressão uniaxial, apresentando a partícula antes e depois da quebra ou substituição, na esquerda e direita, respectivamente.	159
Figura 5.62. Comparação do perfil esforço-deformação experimental e simulado com o PRM.....	160
Figura 5.63. Efeito do módulo de cisalhamento sobre a energia de fratura e a correspondente sobreposição entre elementos (neste caso ilustra-se entre a geometria e a partícula).	161
Figura 5.64. Comparação da energia média de fratura de partículas individuais obtida desde modelo analítico, simulação e dados experimentais.....	161
Figura 5.65. Função quebra de impactos de partícula individual usando bola de 88 mm diâmetro com diversas energias: curva experimental e curvas simuladas.....	162
Figura 5.66. Comparação do raio de captura experimental com os três modelos de quebra de partículas: modelo de ligação de elementos – BPM, modelo de elementos tetraédricos – FBM, e modelo de substituição de elementos – PRM. Ensaios realizados sobre leito de monocama	163
Figura 5.67. Comparação da massa quebrada experimental com os três modelos de quebra de partículas, para arranjos de partículas em diferentes configurações, impactado com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.....	165

Figura 5.68. Comparação da função quebra experimental com os três modelos de quebra de partículas para leitos de partículas em monocamada com diferentes anéis, impactados com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.	165
Figura 5.69. Comparação da função quebra experimental com os três modelos de quebra de partículas para leitos de partículas em diferentes camadas, impactados com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.	166
Figura 5.70. Ilustração dos componentes de um modelo avançado de quebra para uso no DEM com base no modelo de substituição de elementos PRM.	170
Figura 5.71. Famílias de curvas para 2,5 kWh/t (esquerda) e 1kWh/t (direita).	172
Figura 5.72. Famílias de curvas para 0,25 kWh/t.	173
Figura 5.73. Famílias de curvas para as três energias modeladas.	173

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1. Parâmetros dos modelos analíticos usados e suas fontes de referência.....	70
Tabela 3.2. Experimentos virtuais de impacto planejados	71
Tabela 3.3. Parâmetros gerais para simulação no EDEM e no Rocky	76
Tabela 3.4. Características dos computadores usados nas simulações da presente pesquisa	78
Tabela 3.5. Tipo de experimento usado com os modelos para cada etapa do trabalho..	78
Tabela 4.1. Parâmetro dos modelos de quebra BPM do EDEM	81
Tabela 4.2. Valores dos níveis das variáveis de entrada do plano para calibração	89
Tabela 4.3. Características da partícula modelada desde o software Rocky	91
Tabela 4.4. Distribuição de fragmentos padrão modelado para o PRM para a partícula de 5,47 mm	96
Tabela 4.5. Parâmetro dos modelos de quebra do PRM.....	98
Tabela 4.6. Características dos arranjos de partículas usados na presente pesquisa. ...	100
Tabela 4.7. Características da distribuição de esferas usada para modelar cada metapartícula	101
Tabela 4.8. Características dos experimentos virtuais com arranjos de partículas para BPM.....	105
Tabela 4.9. Característica dos experimentos virtuais com arranjos de partículas no FBM	106
Tabela 4.10. Características dos experimentos virtuais com arranjos de partículas no PRM.....	107
Tabela 5.1. Parâmetros dos materiais usados nos modelos analíticos.....	111
Tabela 5.2. Parâmetros individuais dos materiais fornecidos ao DEM.....	111
Tabela 5.3. Parâmetros de contato dos materiais (preliminares) fornecidos ao DEM.	112
Tabela 5.4. Parâmetros de contato dos materiais (calibrados) fornecidos ao DEM.	112
Tabela 5.5. Parâmetros preliminares e calibrados para o modelo de quebra BPM.	113
Tabela 5.6. Parâmetros preliminares e calibrados para o modelo de quebra FBM.	113
Tabela 5.7. Parâmetros preliminares para o modelo PRM – Parte 1.....	114
Tabela 5.8. Parâmetros preliminares para o modelo PRM – Parte 2.....	114
Tabela 5.9. Parâmetros calibrados para o modelo PRM.....	114
Tabela 5.10. Ângulo de repouso final usado em cada modelo de quebra estudado.	147
Tabela 5.11. Parâmetros t_n resultantes da simulação.....	158

Tabela 5.12. Comparação qualitativa das características dos modelos de quebra de partículas BPM e PRM do software EDEM, e o FBM do software ROCKY.....	167
Tabela 5.13. Tabela padrão para 2,5 kwh/t.....	172

LISTA DE SIMBOLOS

Latinos

A	Máximo valor de t_{10} para o material submetido a quebra
A'	Área do material
A_l	Área da seção transversal da ligação
a_c	Parâmetro do modelo de captura de partículas
b_L	Parâmetro que restringe a percentagem de sobreposição das partículas no modelo PRM
b	Parâmetro de ajuste do modelo t_{10}
b_{dr}	Parâmetro de ajuste do BPM conhecido como raio do disco da ligação
b_c	Parâmetro do modelo de captura de partículas
c_c	Parâmetro do modelo de captura de partículas
cm_i	Centro de massa (x, y, z) de uma partícula com índice i usado para caracterizar a posição de uma partícula num arranjo dado
D_l	Diâmetro de um leito de partículas
d_b	Diâmetro de uma bola de impacto
d'	Parâmetro de ajuste do modelo σ_m
d_i	Tamanho representativo das partículas na i -ésima classe
d_o	Parâmetro de ajuste do modelo E_{m50}
d_{kl}	Curva de distribuição de tamanhos com índice k, l usada na progênie do modelo PRM avançado
$d_{i,max}$	Diâmetro da partícula de maior tamanho num leito
$d_{i,ref}$	Parâmetro de ajuste do modelo de quebra do <i>software</i> Rocky, denominado tamanho de referência
E	Energia
E_{m50}	Energia média de fratura das partículas
$E_{m,\infty}$	Parâmetro de ajuste do modelo E_{m50}
E_{min}	Energia limite abaixo da qual a quebra da partícula não acontece
E_{cum}	Energia acumulada até o impacto k , usada nas equações (modelos) implementadas no <i>software</i> Rocky
E'_{cum}	Energia acumulada depois de múltiplos impactos k usada nas equações (modelos) implementadas no <i>software</i> Rocky
e	Coeficiente de restituição
$e_{min,ref}$	Parâmetro de ajuste do modelo de quebra do <i>software</i> Rocky, denominado energia mínima de referência
F	Força
F_c	Força crítica de fratura
F^n	Componente normal total da força de contato
F^t	Componente tangencial total da força de contato
F_0^t	Força de contato tangencial no instante de tempo $t - dt$

F_0^n	Força de contato normal no instante de tempo $t - dt$
F_l	Força total de contato sobre a ligação l
F_l^s	Componente da força de contato cisalhante da ligação l
F_l^n	Componente da força de contato normal da ligação l
$F_l^{n,Total}$	Força total normal de contato atuando sobre a ligação l
$F_l^{t,Total}$	Força total tangencial de contato atuando sobre a ligação l
F_{ij}^n	Força de contato normal imposta sobre a partícula i pela partícula j
F_{ij}^t	Força de contato tangencial imposta sobre a partícula i pela partícula j
F^{ns}	Força normal da mola num sistema mola-amortecedor
F^{nd}	Força normal do amortecedor num sistema mola-amortecedor
F^{ts}	Força tangencial da mola num sistema mola-amortecedor
F^{td}	Força tangencial do amortecedor num sistema mola-amortecedor
$F^{ts(n-1)}$	Força de contato tangencial da mola no intervalo de tempo precedente
F_{p-d}^t	Força tangencial medida no tribômetro <i>pin-on-disk</i> , correspondente à magnitude aplicada sobre o pino pelo disco
F_{p-d}^n	Força normal medida no tribômetro <i>pin-on-disk</i> , correspondente à magnitude aplicada sobre o pino pelo disco
$f_{critica,1}$	Força crítica de resistência da partícula 1
$f_{critica,2}$	Força crítica de resistência da partícula 2 (fragmento de 1)
f_{mat}	Parâmetro de ajuste do modelo de VOGEL e PEUKERT (2005)
$f^n_{aplicada}$	Força normal aplicada sobre partícula
$f_{N,i}$	Força de contato normal sobre partícula inicial
$f_{N,i+1}$	Força de contato normal sobre partícula no instante de tempo $t + \Delta t$
f_{LB}	Força limite de fratura de partícula no modelo de ligação de esferas
f_{LT}	Força limite de fratura de partícula no modelo de elementos tetraédricos
f_L	Força limite de fratura de partícula no modelo de substituição de elementos
f_{pi}	Força aplicada sobre a partícula no instante de tempo i
G	Módulo de cisalhamento
g	Aceleração da gravidade
h_l	Altura de um leito de partículas
I	Momento polar de inercia
I_i	Momento de inercia da partícula ou elemento i
i_m	Elemento mãe do modelo PRM
$i_{f,j}$	Elemento filho do modelo PRM com identificação j
J	Momento de inercia
K_n	Constante de contato de Hertz
k	Número de impactos simples sucessivos no modelo de VOGEL e PEUKERT (2005)
k_1	Rigidez de carregamento no modelo de contato de histerese linear
k_2	Rigidez de descarregamento no modelo de contato de histerese linear

k_{1_i}	Rigidez de carregamento da partícula i
k_{1_j}	Rigidez de carregamento da partícula j
k_{1_p}	Rigidez de carregamento da partícula
k_n	Rigidez normal
k_t	Rigidez tangencial
k_l^n	Rigidez normal da ligação
k_l^t	Rigidez tangencial da ligação
k_p	Rigidez da partícula
$k_{aço}$	Rigidez do aço
k_m	Rigidez do material
k_{bn}	Parâmetro de ajuste do BPM denominado rigidez normal da ligação
k_{bs}	Parâmetro de ajuste do BPM denominado rigidez cisalhante ou tangencial da ligação
L_l	Comprimento de uma ligação entre duas esferas i e j
$l_{x,0}$	Comprimento inicial no eixo x do material
$l_{y,0}$	Comprimento inicial no eixo y do material
$l_{z,0}$	Comprimento inicial no eixo z do material
M_l	Momento total de contato sobre a ligação
M_l^n	Componente normal do momento de contato da ligação
M_l^s	Componente cisalhante do momento de contato da ligação
\bar{m}_p	Massa média da partícula
m_i	Massa da partícula ou elemento i
m_j	Massa da partícula ou elemento j
m^*	Massa equivalente da partícula
N_p	Número de partículas filhas
$N_{cap,i}$	Número de partículas da classe i capturadas num impacto com bola
$P(E)$	Função de densidade de probabilidade da energia de fratura de partícula
Q	Índice equivalente ao número de camadas num arranjo de partículas
q	Índice equivalente ao número de anéis num arranjo de partículas
R_i	Vetor que vai desde o centro da partícula ou elemento i até o contato com outro elemento
R_l	Raio de uma ligação entre duas esferas i e j
R_e^i	Raio do elemento i
R_e^j	Raio do elemento j
r_c	Raio de captura das partículas num impacto
r_e	Raio de contato da colisão da bola de impacto sobre um leito de partículas, também definida como a deformação elástica de uma bola impactada sobre uma superfície plana do mesmo material
r_g	Raio geométrico de captura de partículas num impacto
r^*	Raio equivalente da partícula
r_i	Raio da partícula i
r_j	Raio da partícula j

S	Parâmetro do modelo de quebra do <i>software</i> Rocky, denominado coeficiente da função seleção
T_{ji}^r	Torque de atrito de rolamento imposto sobre a partícula j pela partícula i
t_n	Percentagem de material passante da abertura de peneira equivalente ao tamanho original de partícula dividido pelo número n
t	Tempo
t_0	Tempo inicial zero
U_n	Deslocamento normal do contato (sobreposição)
U_t	Deslocamento tangencial do contato
U_0	Sobreposição residual no modelo de contato de histerese linear
ν'	Módulo ou razão de Poisson
v_i	Velocidade translacional da partícula ou elemento i
$v_{L,p}$	Velocidade das partículas filhas após sua substituição
v_{rel}^n	Velocidade normal relativa
v_{rel}^t	Velocidade tangencial relativa
v_0	Velocidade de uma partícula antes do impacto sobre uma superfície no ensaio de coeficiente de restituição
v_f	Velocidade de uma partícula depois do impacto sobre uma superfície no ensaio de coeficiente de restituição
$W_{m,kin}$	Energia cinética de impacto específica do modelo de VOGEL e PEUKERT (2005)
$W_{m,min}$	Energia limite abaixo da qual um evento de quebra não acontece (Modelo de VOGEL e PEUKERT (2005))
Y	Modulo de Young
y	Variável de integração da função beta incompleta
p_i	Partícula i
x_i, y_i, z_i	Coordenadas cartesianas de uma esfera i
$D_{e,i}$	Diâmetro de uma esfera i
rx, ry, rz	Parâmetros usados para posicionar uma partícula i (esferas i) num arranjo de partículas, denominado razão de deslocamento num eixo de coordenadas cartesianas
X_{fi}, Y_{fi}, Z_{fi}	Posições finais de uma partícula num arranjo dado (q, Q)
N_v	Número de vacantes inicial para a locação das partículas num leito q, Q
N_{vnew}	Número de vacantes final para a locação das partículas num leito q, Q
$D_{p,ref}$	Diâmetro de partícula definido no <i>software</i> , que serve de referência na determinação do valor $D_{dem,i}$ para uso na API de substituição
$D_{dem,i}$	Diâmetro de esfera i para uso em API de substituição e locação no <i>software</i>
$X_{demi}, Y_{demi}, Z_{demi}$	Coordenadas de partícula i para uso em API de substituição e locação no <i>software</i>

Gregos

α_n	Parâmetro de ajuste da função beta incompleta
β_n	Parâmetro de ajuste da função beta incompleta
β_r	Máximo ângulo que forma uma placa plana com o eixo horizontal, correspondente à resistência ao rolamento que contrabalança o torque da gravidade sobre uma partícula em contato estacionário
β_d	Razão de amortecimento no contato entre duas partículas i e j
β	Fator de formato de partículas
Δ'	Deformação de um leito de partículas num impacto
$\Delta\theta_n$	Incremento da rotação normal
$\Delta\theta_t$	Incremento da rotação tangencial
ΔF_l^n	Incremento da componente normal da força de contato da ligação
ΔF_l^s	Incremento da componente cisalhante da força de contato da ligação
ΔF^{ts}	Incremento da força de contato tangencial da mola
ΔM_l^n	Incremento da componente normal do momento de contato da ligação
ΔM_l^t	Incremento da componente tangencial do momento de contato da ligação
ΔU_t	Incremento do deslocamento tangencial do contato
ΔU_n	Incremento do deslocamento normal do contato
Δl_y	Deslocamento no eixo y da amostra de material, dado por esforços laterais
Δl_z	Deslocamento no eixo z da amostra de material, dado por esforços cisalhantes
Δl_x	Deslocamento no eixo x de amostra de material dado por esforços axiais
Δt	Intervalo de tempo
ε	Deformação de um material
ε_c	Deformação de um material na sua fratura
θ_y	Ângulo de deslocamento no eixo y de uma amostra de material, dado por esforços cisalhantes
θ	Parâmetro de ajuste do modelo σ_m
λ	Multiplicador do raio da ligação
μ_r	Coeficiente de atrito de rolamento ou resistência ao rolamento
μ_s	Coeficiente de atrito estático
μ_d	Coeficiente de atrito dinâmico
ρ	Densidade
$\sigma_{c(prm),p}$	Resistência crítica de fratura da partícula no modelo PRM
σ_c	Resistência normal da ligação
σ_{cr}	Parâmetro de ajuste do BPM denominado esforço crítico normal de falha da ligação

σ_{max}	Valor máximo da tensão atuando no contato normal da ligação (Modelo BPM)
σ_m	Desvio padrão geométrico da distribuição de energias de fratura de partícula
τ_{cr}	Parâmetro de ajuste do BPM denominado esforço crítico cisalhante ou tangencial de falha da ligação
τ_c	Resistência tangencial da ligação
τ_{max}	Valor máximo da tensão atuando no contato tangencial da ligação (Modelo BPM)
ϕ	Parâmetro de ajuste do modelo E_{m50}
$\phi_{L,p}$	Razão do raio de partícula do limite inferior de tamanho
$\phi_{F,p}$	Razão do raio de partículas filhas em relação à partícula mãe
ω^n	Velocidade angular normal
ω^t	Velocidade angular tangencial
ω_i	Velocidade angular da partícula ou elemento i

Subscritos

e	Elemento
i	Índice para identificação de partícula ou classe de tamanho da partícula
ij	Entre partículas i e j
j	Partícula j
l	Ligação (correspondente ao modelo BPM)
n	Número índice no modelo t_{10}
n	Componente normal
t	Componente tangencial
k	Índice que caracteriza a identificação de uma curva para uma energia dada
l	Índice que caracteriza a identificação de uma curva dentro uma família de curvas para uma dada energia de índice k

Lista de abreviaturas

<i>DEM</i>	<i>Discrete Element Method</i>
<i>BPM</i>	<i>Bonded Particle Model</i>
<i>PRM</i>	<i>Particle Replacement Model</i>
<i>FBM</i>	<i>Fast Breakage Model</i>
<i>MBP</i>	Modelo do balanço populacional
<i>DWT</i>	<i>Drop Weight Test</i>
<i>CCI</i>	Célula de Carga de Impacto
<i>API</i>	<i>Application Programing Interface</i>
<i>DGB</i>	<i>Discrete Grain Breakage</i>
<i>SAG</i>	<i>Semi-autogenous Grinding</i>
<i>FEM</i>	<i>Finite Element Method</i>
<i>HPGR</i>	<i>High Pressure Grinding Rolls</i>
<i>MBD</i>	<i>Multi-Body Dynamic</i>
<i>VSI</i>	<i>Vertical Shaft Impactor</i>
<i>HSI</i>	<i>Horizontal Shaft Impactor</i>
<i>CSS</i>	<i>Closed Size Setting</i>
<i>RFPA</i>	<i>Rock Failure Processes Analysis</i>
<i>DOE</i>	<i>Design of Experiments</i>
<i>CCD</i>	<i>Central Composite Design</i>
<i>PA</i>	Pará (Cidade do Brasil)
<i>STL</i>	<i>StereoLithographic Language</i>
<i>CAD</i>	<i>Computer-aided Design</i>
<i>LTM</i>	Laboratório de Tecnologia Mineral
<i>UFRJ</i>	Universidade Federal do Rio de Janeiro
<i>COPPE</i>	Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-graduação e Pesquisa de Engenharia

1 INTRODUÇÃO

O estudo da deformação, quebra e fragmentação de materiais geológicos nas escalas micro e macroscópica tem sido tradicionalmente desenvolvido com base em observações diretas e com o auxílio de ensaios de laboratório. O entendimento e a descrição do fenômeno têm sido realizados com o auxílio de diversas teorias, se destacando a mecânica da fratura que, embora atualmente seja limitada para descrições quantitativas nestes materiais, tem auxiliado vastamente o entendimento da fratura de materiais particulados (RUMPF, 1973; SCHÖNERT, 1995). Assim, a ciência da cominuição em particular tem usado o empirismo como a base do seu desenvolvimento. Contudo, graças ao entendimento e à vinculação de diversas ferramentas, com o passar dos anos o caráter empírico tem sofrido transição para descrições fenomenológicas e mecanicistas, visando um futuro com modelos mais robustos e com fundamentação mais sólida.

Algumas das características dos minérios, como a microestrutura, composição, massa específica, tamanho e concentração de trincas, entre outras, ainda não são usadas de forma direta na modelagem dos processos de cominuição, já que as suas relações com a fratura das partículas ainda não são totalmente entendidas. Enquanto isso, na ciência da cominuição têm sido usadas outras propriedades para a caracterização do minério, tais como a energia média de fratura (TAVARES e KING, 1998), a intensidade de fragmentação e a sua relação com a energia aplicada ou absorvida (NARAYANAN e WHITEN, 1983), e a intensidade de dano sofrido pelas partículas (BRIGGS e BEARMAN, 1996; TAVARES e KING, 2002), entre outras. Estas medidas são obtidas como parâmetros de diversos ensaios de quebra de partículas, os quais envolvem a aplicação de esforços dos mais variados tipos.

Por outro lado, os mecanismos de fratura podem se relacionar com o tipo de equipamento de cominuição utilizado. Assim, um dado equipamento exerce esforços característicos que levam a um tipo de quebra e fragmentação também característica. Dentro dos diversos equipamentos usados na moagem, o moinho de bolas é um dos mais tradicionais. Este é um aparelho de redução de tamanho baseado em corpos esféricos que giram no interior de um cilindro, aplicando diversos tipos de esforços sobre a carga de material. Dentro do moinho de bolas é possível identificar dois tipos de microprocessos

de cominuição, que são: a aplicação de esforços predominantemente cisalhantes, causando abrasão, e aqueles predominantemente normais (causando quebra por impacto) de um leito de partículas entre dois corpos moedores (NAPIER-MUNN *et al.*, 1996), tal como se observa na Figura 1.1.

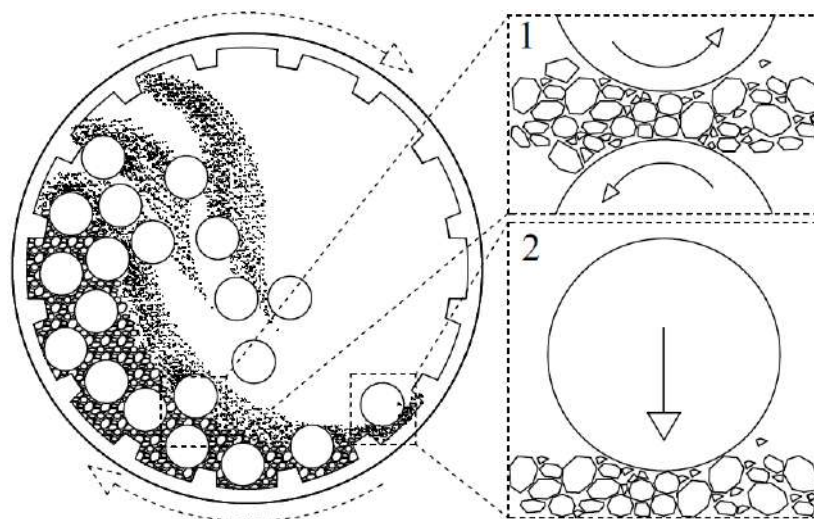


Figura 1.1. Microprocessos de cominuição no moinho de bolas: (1) Abrasão de bolas sobre leito de partículas; (2) Impacto de um leito de partículas com bola.

Considerando a importância de abordar o estudo da cominuição a partir dos microprocessos, diversos autores (CHO, 1986; BOURGEOIS, 1993; TAVARES, 2007) têm usado esta estratégia para a descrição e modelagem do fenômeno, a qual envolve o estudo da quebra de partículas individuais e de partículas formando arranjos. Segundo SCHÖNERT (1995), a quebra de partículas individuais é a situação de esforço de uma partícula sem a interação com outras, envolvendo um evento de quebra simples. Por outro lado, na quebra de arranjos de partículas, consideram-se grupos de partículas que podem estar organizados com geometrias e graus de confinamento variados.

A evolução tecnológica do século XX, assim como o desenvolvimento acelerado da computação nas últimas décadas, têm tornado possível avanços importantes em diversas áreas do conhecimento, entre elas o estudo da cominuição, em termos de tecnologias tanto para caracterização em microescala como simuladores de processo para análises na macroescala. Uma ferramenta computacional que possibilita ligar os fenômenos da microescala aos da macroescala é o denominado Método dos Elementos Discretos “*Discrete Element Method – DEM*” (CUNDALL e STRACK, 1979). O DEM

analisa o movimento e a interação de elementos (partículas), combinando a segunda lei de Newton e as leis da mecânica de contato de sólidos. Assim, o método torna possível a análise tanto de partículas individuais quanto de arranjos de partículas. Esta ferramenta tem sido fundamental nas últimas décadas para o estudo de materiais particulados, mostrando imenso valor na área de cominuição, ao ser capaz de “abrir a caixa preta” para o entendimento do processo. Exemplos disto são os trabalhos de MISHRA e RAJAMANI (1992), CLEARY (1998), CARVALHO e TAVARES (2013), WEERASEKARA *et al.* (2013), BARRIOS e TAVARES (2016), entre outros.

Considerando a abrangência e capacidade do DEM, a sua aplicação no estudo dos microprocessos de cominuição é uma alternativa promissora à experimentação física. No entanto, a técnica originalmente desenvolvida por Cundall e Strack não previa *a priori* que partículas simuladas sofreriam quebra. Felizmente, essa restrição já foi superada com desenvolvimentos mais recentes (POTYONDY *et al.* 1996; POTYONDY e CUNDALL, 2004). Assim, é importante definir se o processo de quebra de partículas será considerado na simulação em DEM, uma vez que existem duas formas de usar a técnica: simulando diretamente a quebra, tal como no trabalho de BARRIOS (2015), ou extraindo informações do simulador, as quais são acopladas, *a posteriori*, a modelos de quebra separadamente, tal como no trabalho de CARVALHO (2013).

A quebra de partículas dentro do ambiente de simulação DEM tem sido descrita por meio de diversas aproximações, como o modelo de ligação de elementos esféricos “*Bonded Particle Model - BPM*” (POTYONDY e CUNDALL, 2004), os modelos de elementos não esféricos (tetraédricos e poliédricos) (POTAPOV *et al.*, 1995) e o modelo substituição de elementos esféricos “*Particle Replacement Model - PRM*” (CLEARY, 2001). Surpreendentemente, poucos têm sido os estudos dedicados a validar a aplicação dessas técnicas, tornando difícil ao usuário julgar a adequação e, até mesmo, a pertinência de cada uma delas ao seu problema de interesse. Uma alternativa para avaliar esses modelos é realizar diversos experimentos virtuais de quebra de partículas e compará-los a resultados de experimentos reais. Com base na capacidade do modelo de interesse de representar a realidade física, e no esforço computacional envolvido, seria plausível a aplicação do modelo na simulação de um processo de cominuição.

O presente trabalho visa analisar comparativamente estratégias atuais para a descrição da quebra de partículas no interior do ambiente do DEM, incluindo o modelo de ligação de elementos “*Bonded Particle Model - BPM*” implementado no *software* EDEM, o modelo de elementos não esféricos “*Fast Breakage Model – FBM*” implementado no *software* Rocky e o modelo de substituição de elementos “*Particle Replacement Model - PRM*”, implementado de forma customizada no *software* EDEM, comparando-os na descrição da quebra de partículas por impacto em leitos.

O presente texto é dividido em seis capítulos. Após essa introdução, o Capítulo 2 trata da revisão da literatura. Os Capítulos 3 e 4 apresentam a metodologia, com o primeiro descrevendo o material e a metodologia experimental, enquanto o último apresenta a metodologia de simulação usando os diferentes modelos e plataformas de simulação. Os resultados e discussão de quebra de partículas individuais e em leitos são apresentados no Capítulo 5. O Capítulo 6 apresenta as conclusões, seguidas das referências bibliográficas.

1.1 OBJETIVO GERAL

Aplicar modelos de quebra de partículas do ambiente de simulação do Método dos Elementos Discretos para o estudo de microprocessos de cominuição.

1.1.1 OBJETIVOS ESPECIFICOS

Modelar e simular experimentos de impacto com bola de partículas individuais e arranjos de partículas em leitos em diferentes configurações usando o modelo de ligação de elementos - BPM, o modelo de elementos tetraédricos – FBM e modelo de substituição de elementos - PRM, do ambiente de simulação do Método dos Elementos Discretos - DEM

Explorar a sensibilidade na descrição da captura de partículas, massa quebrada e fragmentação resultante do impacto de leitos de partículas não-confinados dos vários modelos de quebra estudados (BPM, FBM e PRM) no ambiente DEM.

Definir procedimentos de calibração de parâmetros e validação dos vários modelos de quebra estudados.

Modelar e calibrar no ambiente de simulação DEM, partículas de minério de cobre de Sossego na faixa de tamanho de 6,3 x 4,75 mm usando os modelos de quebra estudados.

Comparar a descrição na quebra de partículas em leitos entre os modelos BPM, FBM e PRM, e validar a sua resposta em relação a resultados experimentais para o minério de cobre de Sossego.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Descrição física da fratura

Diversas aproximações têm sido propostas para explicar a resposta dos materiais à aplicação de esforços, bem como dos mecanismos que governam a fratura. A validade das aproximações propostas é aplicável para materiais específicos. Por exemplo, as teorias de resistência de materiais plásticos e elásticos têm pouca aderência quando são aplicadas a meios heterogêneos, já que estas foram validadas principalmente para meios contínuos, homogêneos e isotrópicos (DIETER, 1986). Os trabalhos de GRIFFITH (1920, 1924), entre outras contribuições (IRWIN, 1948; OROWAN, 1949), têm sido muito importantes para desenvolver o que é denominado como a “Teoria Moderna de Fratura de Materiais”. No entanto, o entendimento da fratura de materiais geológicos (rochas e minérios) ainda representa um importante desafio, devido à heterogeneidade que os caracteriza.

Diversos autores ressaltam a importância da aplicação dos conceitos da mecânica da fratura na cominuição (SCHÖNERT, 1995) uma vez que oferecem algumas das bases para o entendimento do fenômeno da quebra de materiais rochosos, tal como é feito a partir da teoria do Griffith, a qual expõe a fratura dos materiais a partir de falhas ou defeitos, os quais são amplamente encontrados em minérios e rochas.

Teoricamente, para fraturar materiais “perfeitos” (com rede cristalina perfeita) é necessário aplicar o esforço necessário para quebrar as ligações atômicas (ASKELAND, 1996). No processo gera-se deformação isotrópica do material, aumentando a distância entre seus átomos homogeneamente, até que é superada a resistência do material e seus componentes são separados. Cabe ressaltar que os materiais perfeitos não existem, de maneira que o processo real difere do descrito. Especificamente, avaliando os materiais geológicos encontra-se uma realidade ainda mais distante, já que são intrinsecamente heterogêneos e os esforços necessários para a sua ruptura são menores que os teóricos (TAVARES e KING, 1998).

Pode-se estabelecer que quando qualquer material é submetido a um alto esforço externo, ocorre um desequilíbrio das forças internas gerando uma deformação, a qual

precede a sua fratura. A quantificação do processo pode ser realizada mediante ensaios mecânicos, nos quais determina-se a relação esforço-deformação (DIETER, 1986). A descrição desta propriedade é importante para a classificação dos materiais como dúcteis ou frágeis. A ductilidade faz referência ao grau de deformação plástica antes da ruptura do material acontecer, assim o material que apresente pouca ou nenhuma deformação pode ser considerado frágil.

O esforço é a transmissão de uma força através de um sólido. O mesmo pode ser representado por meio de duas componentes: a normal, a qual é perpendicular à superfície; e a componente tangencial, a qual é paralela à superfície.

Existem diversos modos de fratura ou quebra, os quais dependem do modo de aplicação dos esforços. De forma geral, os esforços de tipo normal tendem a separar as partes A e B (tração) ou forçar A sobre B (compressão), enquanto o esforço de cisalhamento tende a deslizar A sobre B (Figura 2.1). Na cominuição, os esforços normais são a forma mais importante de ruptura, no entanto, a magnitude do carregamento por cisalhamento determinará a sua relevância (AUSTIN e CONCHA, 1993).

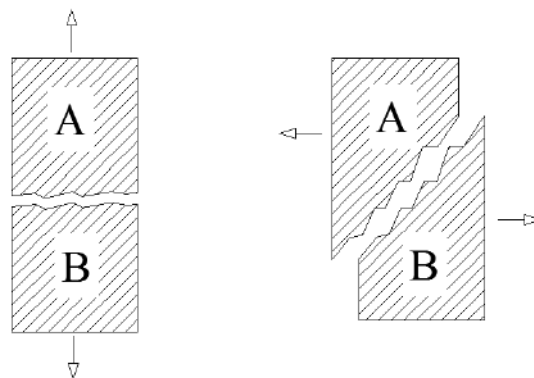


Figura 2.1. Tipo de ruptura de acordo ao esforço aplicado: esforço normal (esquerda) esforço cisalhante (direita).

2.1.1 Teoria da fratura do Griffith

A teoria da fratura estuda a iniciação e propagação de trincas a partir de falhas (trincas microscópicas) em um material. A partir disto, a fratura dos materiais pode ser definida como: frágil, quando ocorrem exclusivamente deformações elásticas antes da ruptura e uma rápida propagação da trinca; e dúctil, caracterizada por uma alta deformação plástica no entorno das trincas, antes e ao longo da sua propagação (AUSTIN

e CONCHA, 1993). Cabe ressaltar que os materiais geológicos (rochas, minérios e carvões) ao serem fraturados em equipamentos de cominuição sofrem comumente fratura frágil, devido à abundante presença de trincas internas.

Em 1920, Griffith estudou o comportamento dos materiais durante a ruptura, supondo que os mesmos são sólidos elásticos frágeis e com um elevado número de trincas microscópicas (falhas do Griffith). Assim, ao submeter um material a carregamento, concentradores de esforços surgem nos extremos das falhas, gerando uma frente de ruptura onde as trincas vão se propagar. Deste modo, quando aplicamos carregamento em uma determinada direção sobre um sólido que apresenta uma cavidade, a fissura abrirá sob tração, avançando na direção perpendicular ao esforço, tal como se ilustra na Figura 2.2. Considerando as microfraturas ou defeitos como os responsáveis pela falha dos materiais, Griffith propôs que a concentração dos esforços ocorre nos extremos das microfraturas. Deste modo, a resistência de um material é menor que a resistência ideal, devido ao fato que o esforço global não tem que ser o necessário para romper todas as ligações ao mesmo tempo, só aquelas que contornam a extremidade das microtrincas. Evidentemente, na presença de múltiplos defeitos é possível considerar uma diminuição adicional no esforço crítico de ruptura.

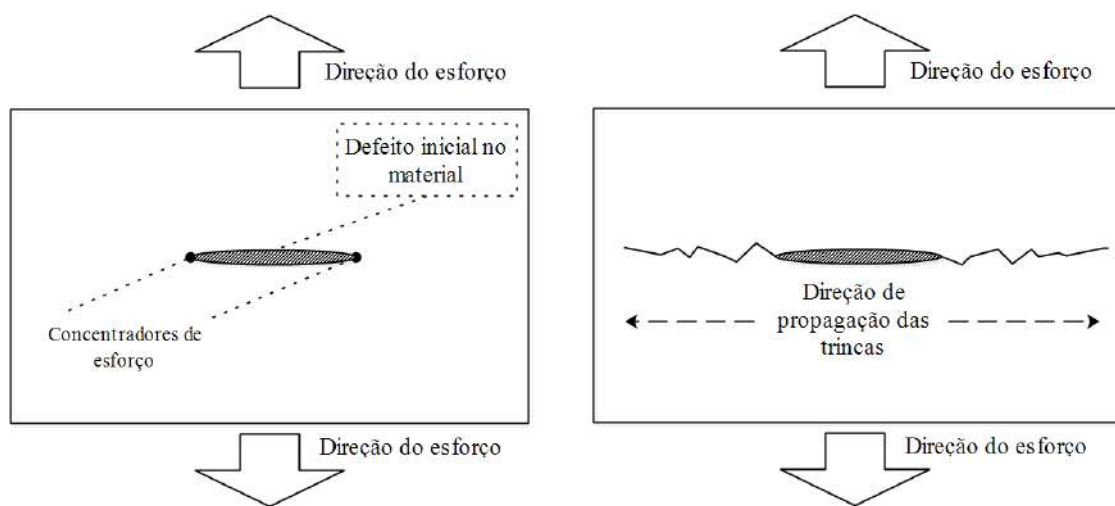


Figura 2.2. Descrição da falha sobre esforços de tração.

Na Figura 2.2 observa-se a tração externa de um material com um defeito perpendicular ao esforço, sendo a responsável da propagação das trincas no material. A aplicação deste tipo de esforços externos em cominuição é pouco viável na prática. No

entanto, RUMPF (1973) encontrou mediante uma análise detalhada dos esforços externos de tipo compressivo, o aparecimento de esforços internos de tração na ponta de uma elipse (trinca) de orientação adequada numa partícula (Figura 2.3).

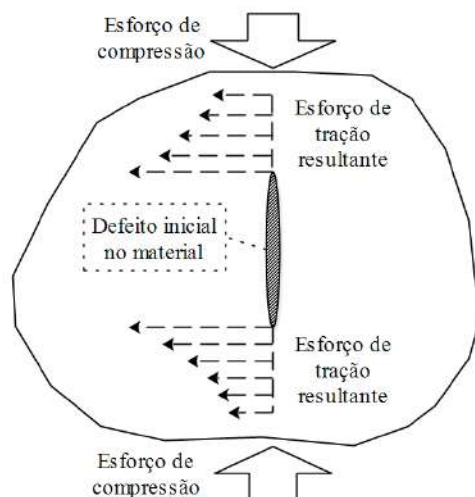


Figura 2.3. Esforços de tração causados pela aplicação da compressão.

Parte das limitações de aplicar a teoria de Griffith e a mecânica da fratura para a quantificação do esforço crítico de fratura de materiais geológicos reside na necessidade de conhecer as dimensões e orientação da ampla quantidade de defeitos num material deste tipo, para assim determinar aqueles que potencialmente podem conduzir à sua falha.

Apesar das limitações quantitativas, a contribuição da mecânica da fratura na teoria da cominuição tem sido importante, possibilitando o entendimento do fenômeno de fratura a partir das trincas internas dos materiais, sendo aqueles materiais que deformam menos elasticamente mais susceptíveis à formação destas (SCHÖNERT, 1995).

2.1.2 Microestrutura e fratura

As relações existentes entre a ruptura de materiais e a microestrutura são bem conhecidas para muito tipos de materiais, mas, quando se trata de partículas minerais e rochas, essas relações ainda não estão claras. A dificuldade encontrada reside nas características microestruturais deste tipo de materiais, as quais apresentam alta

heterogeneidade, mostrando ampla presença de trincas, poros, inclusões, entre outras peculiaridades.

Particularmente, como foi descrito por Griffith, a presença de trincas prejudica a resistência dos materiais geológicos, no entanto, as descontinuidades descritas nestes pode beneficiar a sua resistência, já que pode evitar o rápido crescimento das trincas, favorecendo a sua propagação através das descontinuidades, criando assim caminhos de alta densidade de trincas com efeito dissipador de energia, o qual esgota a energia destas e freia a sua propagação. A característica descrita pode ser vista como uma habilidade da microestrutura a acumular dano sem falhar de forma catastrófica, tal como estudado por TAVARES (2000). O autor observou uma rápida acumulação de dano para o vidro e o quartzo e uma gradual acumulação de dano para o calcário e o mármore, sendo esta última atribuída ao enfraquecimento intergranular.

Considerando o acúmulo de dano previamente descrito é possível identificar dois modos de controle na falha: controle por iniciação de trincas e controle por propagação de trincas. O primeiro é válido para materiais frágeis e faz referência à fratura do sólido quando uma falha crítica pré-existente é ativada (condição de probabilidade), sendo a distribuição de falhas restantes na partícula não afetadas inicialmente. Por outro lado, o segundo modo refere-se ao processo de crescimento e coalescência de trincas subcríticas prévio à propagação instável das trincas, o qual conduz à fratura. Este último modo é possível de observar em materiais quase-frágeis, nos quais seria necessário a aplicação de maior energia para fraturá-los. TAVARES e NEVES (2008) observaram este fenômeno no nível microscópico, em rochas que apresentaram intenso microfraturamento transgranular e intragranular previamente à aplicação dos esforços. Vale ressaltar que isto é válido para partículas com tamanhos de alguns poucos milímetros, sendo que, em tamanhos menores o controle é dado pela iniciação de trincas.

Além das falhas subcríticas pré-existentes, existem outros fatores que influenciam o processo de fratura, tais como a presença de micas, poros, entre outros, os quais podem favorecer ou prejudicar a resistência. LINDQVIST *et al.* (2007) revisou a literatura correspondente a rochas usadas como materiais de construção, mostrando que o tamanho do grão influencia fortemente a resistência destas, sendo as rochas do mesmo tipo e com matriz de grão fino, geralmente mais resistentes. Adicionalmente, o autor observou que

uma ampla distribuição de tamanhos de grão oferece maior resistência. O mesmo acontece com o formato do grão, o qual, sendo mais complexo (anédrico), incrementa a sua resistência, já que nesse caso não existem limites bem definidos que podem agir como descontinuidades, favorecendo a propagação de trincas e assim a fratura. Adicionalmente, a respeito do contato de grão e contato de fase, é descrito que o primeiro apresenta maior influência nas propriedades mecânicas, devido a que incide como iniciador e propagador de trincas, enquanto o segundo como uma descontinuidade.

2.2 Microprocessos da quebra de partículas

Os conceitos revisados na seção anterior servem como base para entender algumas das relações que existem entre a fratura e as características físicas e microestruturais dos materiais aqui estudados. Contudo, estas abordagens dificilmente podem ser aplicadas na descrição da fratura de materiais geológicos, devido à alta complexidade dos cálculos para descrever a falha de uma partícula, fato explicado pela heterogeneidade intrínseca deste tipo de materiais. Adicionalmente, o problema é ainda mais complexo para aplicações em cominuição, já que seria necessário descrever não só a fratura de uma rocha, mas a quebra de um sistema de rochas com características relativamente diferentes.

Por outro lado, além dos modelos semi-empíricos (HERBST e FUERSTENAU, 1980; KARRA, 1982) as diversas abordagens empíricas baseadas na relação energia-redução de tamanho (KICK, 1883; RITTINGER, 1857; BOND, 1952) têm apresentado sucesso em descrever a fragmentação com base em cálculos relativamente simples, oferecendo assim uma medida útil, tal como a energia absorvida por unidade de massa necessária para quebrar partículas numa máquina de cominuição. O método do balanço populacional (MBP) aplicado para sistemas de partículas (HULBURT e KATZ, 1964), por sua parte, tem sido a base de diversos dos modelos usados para descrever quantitativamente a cominuição, tal como no modelo mecanicista recentemente desenvolvido por TAVARES e CARVALHO (2009). O MBP pode ser considerado como um balanço de massas para diferentes tamanhos de partícula, o qual descreve o aparecimento e desaparecimento de material contido em uma faixa determinada de tamanho de partículas.

O termo “quebra de partículas” descreve os fenômenos que acontecem desde o início até o final da aplicação de um determinado esforço, resultando na fragmentação de uma ou mais partículas. Assim, um evento de quebra é caracterizado pelo fato que a energia disponível num sistema (esforço proporcionado) é consumida pelas partículas e seus fragmentos (SCHÖNERT, 1995). É importante ressaltar que a maior parte da energia aplicada nas partículas não é usada na quebra, sendo dissipada como calor, usada como energia superficial dos fragmentos e armazenada nas modificações estruturais. A quebra de partículas pode ser classificada em duas etapas: quebra primária e secundária. A primeira é caracterizada por duas medidas: a resistência da partícula, correspondente à força de ruptura, e a energia específica de quebra, a qual é a energia fornecida até o ponto de ruptura, representado pelo pico máximo de força (Figura 2.4).

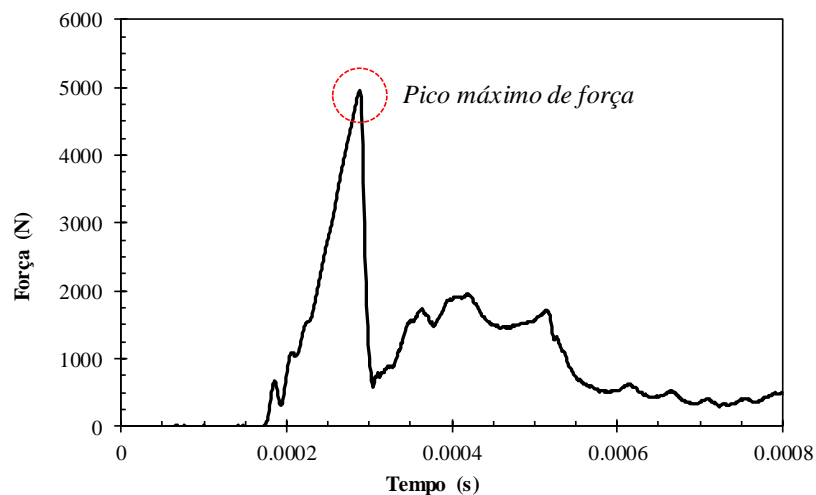


Figura 2.4. Ensaio em Célula de Carga de Impacto representando o perfil força-tempo.
(Fonte: Dados históricos do LTM).

A segunda etapa é controlada pela absorção de energia, representando o efeito da redução de tamanho (SCHÖNERT, 1995). As variações nas medidas destas etapas e a fragmentação (Figura 2.5) dependem, como já foi visto, da resposta do material, comportando-se de forma elástica ou inelástica.

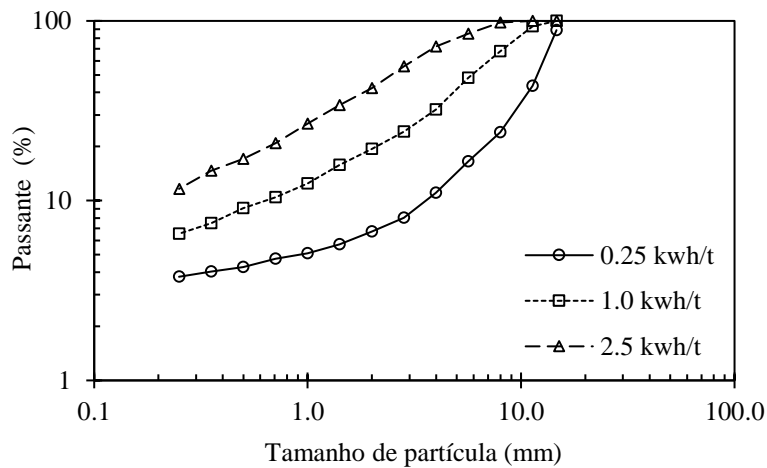


Figura 2.5. Produto de um ensaio de queda de peso (DWT) para diferentes energias aplicadas. (Fonte: Dados históricos do LTM).

2.2.1 Classificação dos tipos de carregamento de partículas

SCHÖNERT (1996) propôs uma classificação de diferentes cenários que podem se apresentar no carregamento de partículas em equipamentos de cominuição. Tal classificação (Figura 2.6) foi estruturada considerando a geometria do arranjo de partículas, a sua distribuição de tamanhos, a velocidade de carregamento e o nível de confinamento aplicado sobre estas. Observam-se, na primeira coluna da Figura 2.6 as características do arranjo de partículas, sendo partícula individual a situação na qual o esforço é aplicado sobre uma única partícula; leito em monocamada, várias camadas e ideal, a situação de esforço de múltiplas partículas em contato entre si, dispostas geometricamente tal como tem sido ilustrado. Por outro lado, a velocidade de carregamento sobre as partículas se associa ao tipo de equipamento usado para aplicá-las esforços. Do mesmo modo, o nível de confinamento faz referência ao grau de restrição lateral presente nestes equipamentos, os quais são de tipo uniaxial. Finalmente, a distribuição de tamanho define a dispersão da população de partículas carregada, ou seja, apresentam todas aproximadamente o mesmo tamanho (monodisperso) ou têm uma distribuição de tamanhos diferentes (polidisperso).

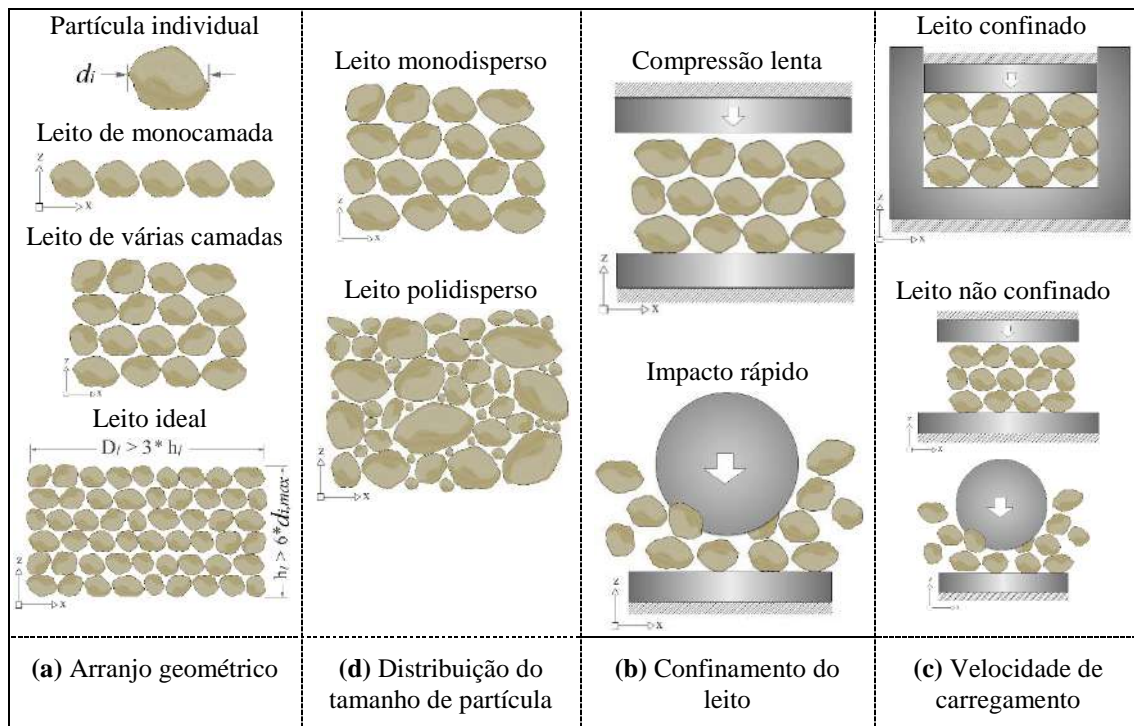
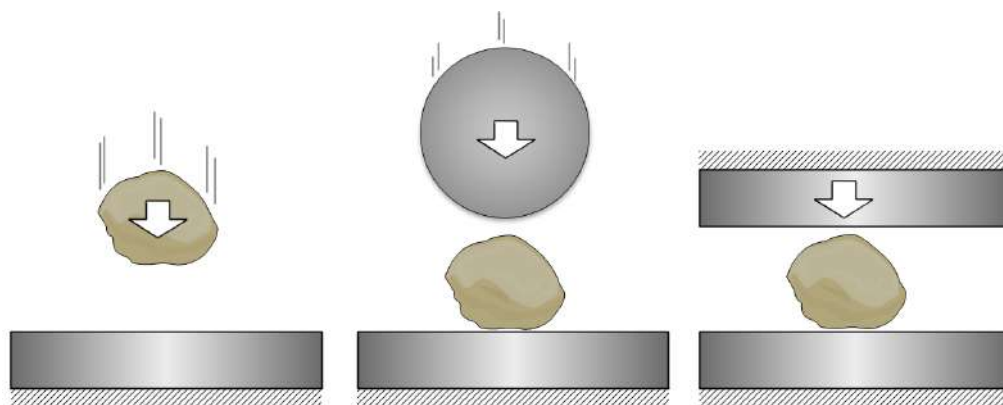


Figura 2.6. Classificação dos leitos de partículas dentro do ambiente de cominuição, sendo d_i o diâmetro ou tamanho da partícula individual; $d_{p,max}$ o diâmetro da maior partícula do leito, h_l a altura do leito de partículas; e D_l o diâmetro do leito de partículas. (modificado de: BARRIOS, 2015).

2.2.2 Caracterização de partículas individuais

A caracterização de partículas individuais é a base para o desenvolvimento de modelos de cominuição capacitados a descrever a redução de tamanhos de partícula em equipamentos de cominuição. Existe uma extensa variedade de ensaios de laboratório que permitem tal caracterização, podendo ser classificados de acordo com os dois principais modos de cominuição que conduzem à fratura das partículas: compressão e abrasão. A presente pesquisa está focada exclusivamente nos testes de tipo compressivo, os quais são classificados de acordo com o modo de aplicação de esforços e o número de contatos em: impactos simples, impacto duplos, e compressão lenta (TAVARES, 2007) (Figura 2.7).



(a) Impactos simples (b) Impactos duplos (c) Compressão lenta

Figura 2.7. Diferentes tipos de ensaios de quebra de partículas individuais.

Os ensaios de impacto simples podem ser realizados em testes de queda de peso ou pelo lançamento de partículas contra uma superfície sólida. Os de impacto duplo são aqueles nos quais a amostra é comprimida por duas superfícies em carregamento rápido. Os ensaios de compressão são realizados usando um carregamento lento e controlado com o auxílio de um equipamento tipo prensa.

A partir dos testes descritos é possível determinar diversas propriedades no minério, no entanto, a metodologia de cálculo difere de ensaio para ensaio. A seguir se apresentam alguns dos ensaios de caracterização de partículas individuais mais frequentemente usados.

2.2.2.1 Ensaios de impacto simples

Podem se classificar como impactos de baixa velocidade e impactos de alta velocidade. O primeiro grupo é representado pelos testes de queda, onde uma partícula é liberada sobre a ação da gravidade e impacta contra uma placa metálica. Considerando que a energia específica de fratura é dependente do tamanho de partícula, o teste é útil apenas para partículas grosseiras, uma vez que a energia específica de impacto máxima é limitada. O segundo grupo é representado por ensaios onde são usados equipamentos para impulsionar as partículas contra uma superfície sólida. Com este tipo de equipamento tem-se estudado as distribuições de probabilidade de fratura, distribuição de fragmentos da

quebra após um impacto com uma energia dada, entre outras propriedades (TAVARES, 2007).

2.2.2.2 Ensaios de impactos duplos

Dentro deste grupo se encontram os ensaios de queda de peso e os ensaios na célula de carga, entre outros.

2.2.2.2.1 Ensaios de queda de peso (DWT)

Neste ensaio a energia aplicada é relacionada com a área superficial criada ou a distribuição de tamanhos das partículas filhas após o impacto. O ensaio consiste em deixar cair desde uma altura conhecida um peso sobre uma partícula disposta numa superfície sólida. Este sistema tem sido modificado de muitas formas para diferentes propósitos, tal como estudar a quebra primária e os efeitos das geometrias dos pesos sobre a quebra e fragmentação das partículas (TAVARES, 2007).

2.2.2.2.2 Ensaios na célula de carga de impacto - CCI

A célula de carga de impacto é um híbrido entre um simples aparelho de queda de peso e a barra dividida de Hopkinson. O equipamento consiste de uma barra longa de aço em posição vertical instrumentada com sensores de deformação, na qual são posicionadas as partículas e impactadas em queda livre seja por uma esfera de aço ou por uma bigorna. Mediante o impacto é produzida uma onda de choque sobre a partícula, sendo uma parte transmitida à barra, a qual está acoplada a um sistema de aquisição de dados, que registra a força, transmite e gera o perfil de esforço ao longo do tempo. A CCI permite distinguir entre as etapas de quebra primária e secundária da partícula. Dois parâmetros de especial significância são obtidos usando a CCI: a energia específica de fratura de partícula, que determina a energia mínima necessária para quebrar uma partícula frágil; e a rigidez da partícula, que representa a taxa na qual a energia de deformação é armazenada no material com uma deformação antes da fratura (TAVARES e KING, 1998).

2.2.2.3 Ensaios de compressão

Os ensaios de compressão representam uma importante vantagem com relação aos tradicionais ensaios de queda de peso, já que as forças aplicadas e as deformações podem ser registradas diretamente ao longo do teste, a fim de determinar o perfil de carga-deformação e, assim, várias medidas relacionadas com a resistência, sendo de especial interesse a energia de fratura primária das partículas, a qual é calculada pela integração numérica do perfil força-deformação (TAVARES, 2007). Considerando o controle do carregamento no ensaio, o mesmo permite a coleta dos fragmentos da quebra primária.

2.2.3 Modelagem da quebra de partículas individuais

A aplicação de esforços mecânicos em partículas individuais pode resultar na fratura destas ou no seu enfraquecimento. Diversas características da partícula determinam qual situação irá ocorrer. Uma característica da partícula que irá definir o resultado é a energia de fratura da partícula. Assim, se um esforço apresenta uma energia de magnitude superior a esta, a partícula irá quebrar. A quantificação da quebra é dada por meio da medição e classificação da distribuição dos fragmentos, sendo estes mais finos quanto maior for a energia aplicada. Por outro lado, no caso no qual a partícula é submetida a esforços com uma energia inferior à de fratura da partícula, esta não irá quebrar, mas vai apresentar dano. A quantificação do dano poderia ser avaliada por meio da medição da densidade de trincas internas no material (TAVARES e KING, 2002). Contudo, na prática são usados impactos repetidos de baixa energia, até ocorrer a fratura da partícula. Com este procedimento é associado o dano em termos da redução da energia de fratura da partícula.

2.2.3.1 Modelagem da probabilidade de quebra e energia de fratura de partículas individuais

Diversos fatores contribuem para a fratura das partículas, de modo que o resultado não é facilmente previsível. Assim, quando uma partícula é submetida a um único impacto é capaz de absorver uma quantidade de energia antes da ruptura. Logo, a energia de fratura da partícula é uma propriedade do material, a qual é função de seu tamanho, forma, e orientação relativa da partícula apresentada no momento do esforço (relativo ao campo

de esforços externo), já que as partículas apresentam caracteristicamente formas irregulares. Além disto, a presença na partícula de defeitos ou falhas prévias ao esforço pode levar à sua ruptura a baixas energias. A existência deste tipo de irregularidades no material tem um caráter aleatório, de maneira que partículas de um mesmo material, com tamanho e forma controlados, apresentam uma ampla variação na energia de fratura devido à presença de diversos concentradores de esforço na partícula, ou seja, falhas microscópicas que geram uma inerente aleatoriedade ao processo de fratura dos minérios e rochas (KING, 2001). Esta propriedade, denominada probabilidade de fratura, tem sido já modelada por diversos autores como TAVARES e KING (1998), VOGEL e PEUKERT (2003), entre outros.

Na Figura 2.8, é ilustrada a função de probabilidade construída com o modelo de TAVARES e KING (1998). A curva pode ser interpretada de duas formas: como uma distribuição acumulada de energia de fratura da partícula, ou como a probabilidade de quebra de uma partícula individual em função da energia de esforço.

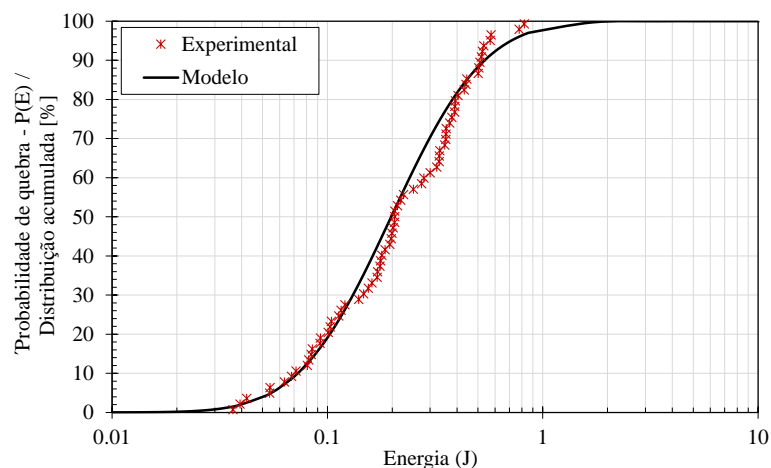


Figura 2.8. Distribuição acumulada de energias de fratura para amostra de minério de cobre de Sossego na faixa de 9,5 x 6,3 mm. Comparação entre dados experimentais e o modelo de TAVARES e KING (1998).

2.2.3.1.1 *Modelo de Probabilidade de TAVARES e KING (1998)*

Para a descrição da variabilidade dos resultados da quebra de partículas individuais, TAVARES e KING (1998) propuseram a representação dos dados mediante a distribuição estatística Log-Normal, na forma do modelo apresentado na Equação 2.1:

$$P(E) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\ln E - \ln E_{m50}}{\sqrt{2\sigma_m^2}} \right) \right] \quad \text{Eq. 2.1}$$

Na qual E_{m50} e σ_m são, respectivamente, a mediana e desvio padrão da distribuição, descritos por meio das Equações 2.2 e 2.3 (CARVALHO e TAVARES, 2013), as quais variam com o tamanho de partícula d_i :

$$E_{m50} = E_{m,\infty} \left[1 + \left(\frac{d_o}{d_i} \right)^\phi \right] \quad \text{Eq. 2.2}$$

$$\sigma_m = \sigma_\infty \left[1 + \left(\frac{d'}{d_i} \right)^\theta \right] \quad \text{Eq. 2.3}$$

Na qual d_i é o tamanho representativo de partículas na i-ésima classe, $E_{m,\infty}$, d_o , ϕ , d' e θ , são parâmetros do modelo específicos do material.

2.2.3.1.2 Modelo de Probabilidade do VOGEL e PEUKERT (2003)

A aproximação de VOGEL e PEUKERT (2003) para a descrição da variabilidade dos resultados da quebra de partículas usa como base a distribuição estatística de Weibull (WEIBULL, 1951):

$$P(E) = 1 - \exp \{ -f_{mat} \cdot d_i \cdot k(E - E_{min}) \} \quad \text{Eq. 2.4}$$

Na qual f_{mat} é o parâmetro do modelo da propriedade de quebra do material, d_i o tamanho de partícula representativo inicial, k o número de impactos sucessivos com energia de impacto simples, e E e E_{min} são, respectivamente, a energia aplicada e a energia limite abaixo da qual a quebra não acontece. Estes valores são, respectivamente, equivalentes ao $W_{m,kin}$ e $W_{m,min}$ apresentados na equação original pelo autor.

Se comparado ao modelo de probabilidade de TAVARES e KING (1998) o modelo de VOGEL e PEUKERT (2003) descreve os resultados de probabilidade de quebra de forma muito mais sintética, utilizando apenas uma equação, em contraste ao primeiro, que descreve por meio de três expressões. O modelo ainda leva em consideração o número de impactos.

2.2.3.2 Modelagem da fragmentação de partículas individuais

Quando o esforço aplicado sobre uma partícula é o suficiente para superar a sua resistência, a partícula fratura, gerando uma distribuição de fragmentos. O tipo de esforço aplicado, a sua intensidade e as características do material determinam o tipo de fragmentação que uma partícula sofre. Assim, a fragmentação pode ser entendida como o resultado físico imediatamente após a transmissão de energia através de uma partícula, refletido na respectiva divisão das partes que formam a partícula.

Dentro dos modos de fragmentação mais comuns se encontra a clivagem, o estilhaçamento, e o lascamento. A clivagem acontece quando o sólido apresenta uma superfície de preferência, ao longo da qual a fratura provavelmente ocorra. Se a quebra subsequente dos fragmentos filhos não ocorre (baixa intensidade de aplicação de energia) o mecanismo tende a produzir vários fragmentos grandes e uma grande quantidade de finos, originados nos pontos de aplicação do esforço, tal como se observa na Figura 2.9. O conjunto de fragmentos gerados neste modo de quebra obedece a uma distribuição de tamanhos de tipo bimodal, também conhecida como função quebra (KING, 2001).

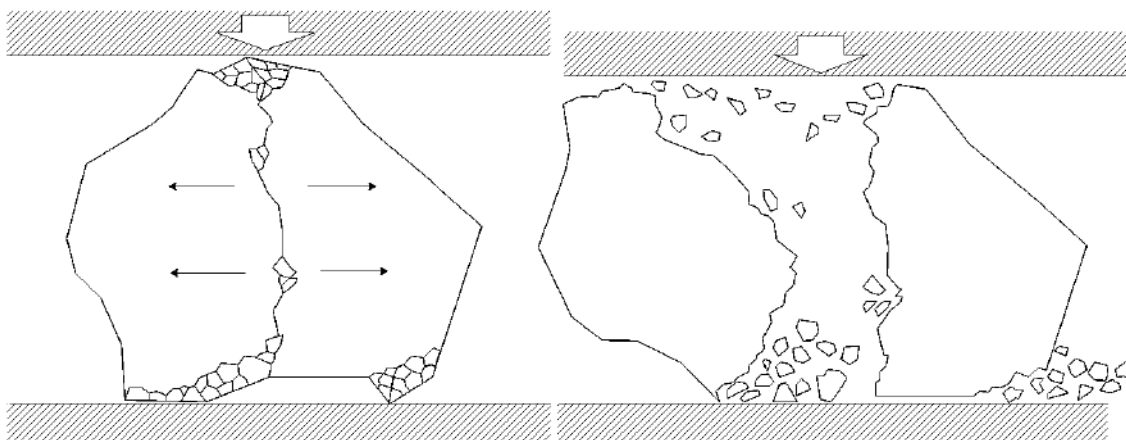


Figura 2.9. Quebra por clivagem de partícula de minério em compressão uniaxial

Por outro lado, o modo estilhaçamento é induzido por rápida aplicação de esforços compressivos (elevadas taxas de aplicação de energia). O processo consiste na fratura das partículas mães (de tamanho original), seguido imediatamente pela fratura sequencial das sucessivas gerações de fragmentos filhos (partículas após a quebra) até que toda a energia disponível para fratura seja dissipada. Finalmente, o modo lascamento é gerado quando o esforço normal aplicado não é suficientemente alto para causar a fratura de partículas

grosseiras, gerando assim uma significativa quantidade de partículas muito menores que a partícula mãe, características dos esforços de cisalhamento. Diferente dos modos anteriores, neste processo não é observada a destruição da partícula mãe, mas sim a mudança delas para as classes de tamanhos imediatamente menores (KING, 2001).

Uma das aproximações mais comuns para a modelagem da distribuição de fragmentos da quebra foi proposta por NARAYANAN e WHITEN (1983). Os autores propuseram a caracterização de tais curvas por meio dos parâmetros ' t_n ', os quais descrevem a fração passante de um tamanho n vezes menor que o tamanho inicial, sendo o parâmetro t_{10} o mais comumente utilizado na área, e refere-se à porcentagem do produto que passa por uma peneira de abertura de 1/10 do tamanho de partícula inicial. O índice de quebra apresenta uma relação exponencial com a energia aplicada (E), tal como é descrito na Equação 2.5 (NAPIER-MUNN *et al.*, 1996):

$$t_{10} = A[1 - \exp(-bE)] \quad \text{Eq. 2.5}$$

Na qual A e b são parâmetros do modelo específicos do material, sendo A o máximo valor do t_{10} , ou seja, o nível máximo de redução de tamanho de partícula em um evento de impacto simples.

Para a construção de uma função de distribuição de tamanhos, evidentemente precisa-se de mais de um ponto na curva. Assim, além do valor do t_{10} é necessária a determinação de parâmetros t_n adicionais, os quais podem ser interpolados para a obtenção de uma curva completa. Uma serie de pontos da curva que poderia ser usada corresponde aos valores t_2 , t_4 , t_{25} , t_{50} e t_{75} . A sua determinação é possível a partir do valor do t_{10} , usando diversos modelos baseados em distribuições truncadas padrão, como a de Rosin-Rammler (KING, 2001; TAVARES, 2004). Uma outra função que poderia ser aplicada para a obtenção e interpolação dos pontos t_n determinados é a função beta incompleta (Equação 2.6), tal como sugerido por MILIN (1994), na qual é necessário o ajuste de dois parâmetros para cada valor de n (α_n e β_n), que podem ser determinados experimentalmente desde as curvas $t_{10} \times t_n$ de ensaios DWT (Figura 2.10). Um método de obtenção precisa de curvas não superpostas da distribuição de tamanhos do produto foi proposta por CARVALHO (2009, 2013 e 2015):

$$t_n(t_{10}, \alpha_n, \beta_n) = \frac{1}{\int_0^1 y^{\alpha_n-1} (1-y)^{\beta_n-1} dy} \int_0^{t_{10}} y^{\alpha_n-1} (1-y)^{\beta_n-1} dy \quad \text{Eq. 2.6}$$

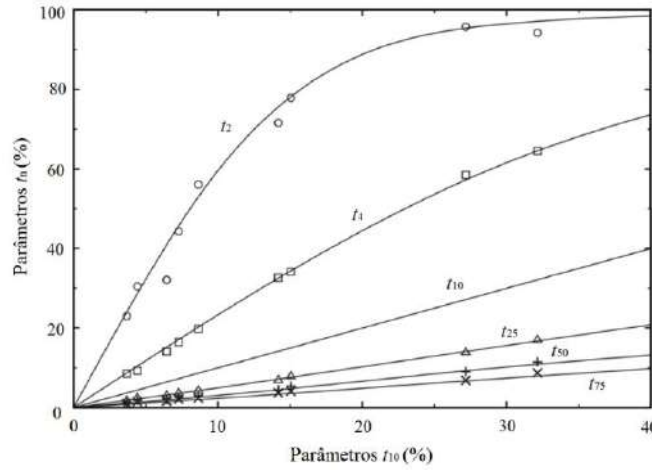


Figura 2.10. Relação entre t_{10} e t_n para um minério de cobre. Os símbolos representam os dados calculados e as linhas o ajuste usando a função beta incompleta (TAVARES, 2007)

Diversas modificações do modelo original t_{10} têm sido propostas para a sua customização (BOURGEOIS, 1993; BANINI, 2002), sendo a seguir apresentados em mais detalhe as aproximações de TAVARES (2004), e de SHI e KOJOVIC (2007).

2.2.3.2.1 Modelo de TAVARES (2004)

O modelo proposto por TAVARES (2004) considera a influência do tamanho de partícula sobre o t_{10} mediante o seu vínculo com a energia média de fratura E_{m50} (Equação 2.2), a qual considera o incremento da energia específica de fratura de partículas com a diminuição do tamanho destas. A relação resultante é apresentada na Equação 2.7:

$$t_{10} = A \left\{ 1 - \exp \left[-b \left(\frac{E}{E_{m50}} \right) \right] \right\} \quad \text{Eq. 2.7}$$

2.2.3.2.2 Modelo t_{10} de SHI e KOJOVIC (2007)

Considerando a hipótese de VOGEL e PEUKERT (2003, 2004, 2005) da aplicação do modelo de probabilidade de fratura para a descrição qualitativa da função de distribuição da quebra, SHI e KOJOVIC (2007) modificaram esta função visando a descrição quantitativa do t_{10} . A expressão resultante é apresentada na forma da Equação 2.8:

$$t_{10} = A \{1 - \exp[-f_{mat} \cdot d_i \cdot k(E - E_{min})]\} \quad \text{Eq. 2.8}$$

Na qual o valor do produto $f_{mat} \cdot d_i$ é análogo ao b de outros modelos t_{10} e o produto $k(E - E_{min})$ é análogo aos valores E da Equação 2.5 e ao valor E/E_{m50} do modelo do TAVARES (2004) (Equação 2.7).

2.2.4 Quebra de leitos de partículas

A complexidade do estudo da quebra de leitos de partículas reside na quantidade de fatores estocásticos associados ao processo. Isto é, somar a natureza probabilística envolvida na fratura de partículas individuais com outro conjunto de variáveis, tais como os fatores geométricos associados ao tipo de arranjo de partículas, o confinamento, os tamanhos das partículas, a sua distribuição, assim como as características dos sistemas de carregamento, entre outras variáveis. A importância do seu estudo nasce a partir das situações que se apresentam em equipamentos de cominuição, como moinhos de bolas, prensas de rolos, entre outros, nos quais as partículas são submetidas a esforços não só individualmente, mas formando leitos.

Em comparação com a quebra de partículas individuais, a quebra de leitos de partículas pode se considerar um processo ineficiente, no qual precisam-se em torno de duas vezes a quantidade da energia necessária para quebrar as partículas individualmente (FUERSTENAU *et al.*, 1991). Certamente, a quebra em leitos de partículas não deve ser associada com a energia aplicada, mas com a quantidade de energia absorvida pelo leito (SCHÖNERT, 1995). A perda de energia está associada a diversos fatores, dentro dos quais se encontra o atrito, o efeito de despressurização das paredes num leito confinado e o grau de empacotamento das partículas (SCHÖNERT, 1996). Estes fatores mostram a complexidade associada na modelagem do processo, sendo que a energia aplicada num leito não é distribuída uniformemente sobre o volume de partículas.

2.2.4.1 Modelagem da quebra de leitos de partículas

Diversos autores têm desenvolvido modelos para descrever a quebra de leitos de partículas, envolvendo diferentes variáveis, por exemplo: LIU e SCHÖNERT (1996) estudaram a influência da distribuição de tamanhos das partículas da alimentação, desenvolvendo um modelo para fração de partículas quebradas e função quebra. Por outro

lado, FUERSTENAU *et al.* (1996) avaliaram a influência da pressão e da resistência das partículas sobre a absorção de energia. No trabalho foram propostas relações analíticas para as relações entre a pressão, massa carregada e energia utilizada e a fragmentação resultante. Vale ressaltar que os dois estudos discutidos previamente têm como base experimentos de compressão lenta, visando a aplicação em equipamentos de cominuição que usam este princípio.

Por outro lado, BARRIOS *et al.* (2011) investigaram a quebra de leitos não confinados de partículas monodispersas por impacto de uma esfera de aço sob condições similares às encontradas em moinhos tubulares. Em particular foi estudada a influência do tamanho de partícula, energia de impacto, tamanho da bola e configurações do leito. A partir disso foram propostas aproximações matemáticas que descrevem a influência destas variáveis na quebra de leitos de monocamada de partículas não confinadas. Este estudo apresenta dois componentes: por um lado, um modelo de repartição de energia no leito, o qual descreve a redução radial da probabilidade de fratura de partículas longe dos pontos de colisão do elemento de impacto; por outro lado, um modelo que descreve o raio de captura da bola no leito de monocamada, o qual é baseado em uma combinação da teoria de Hertz e um modelo geométrico.

A massa de material capturado é estimada a partir do produto do número de partículas capturadas e o peso médio das mesmas. O número de partículas capturadas $N_{cap,i}$ é igual a 1, quando $r_c < d_i/2$ ou é calculado mediante a Equação 2.9, quando $r_c \geq d_i/2$, sendo r_c o raio de captura e d_i o tamanho médio de partículas capturas pela bola.

$$N_{cap,i} = \frac{1}{4} + \frac{3}{4} \left(\frac{2r_c}{d_i} \right)^2 \quad \text{Eq. 2.9}$$

O raio de captura é calculado a partir da soma de duas componentes: o raio de contato da colisão da bola - r_e (Equação 2.10), e o raio geométrico de captura - r_g (Equação 2.11). Para o entendimento físico destas componentes é apresentada a Figura 2.11, na qual se ilustra a variável r_e (esquerda), definida como a deformação elástica que uma bola rígida de diâmetro d_b apresenta no impacto com uma superfície plana do mesmo material. Adicionalmente, na Figura 2.11 (direita) ilustra-se a variável r_g , a qual é estimada a partir da equação do triângulo retângulo. Quando a velocidade da bola é maior, existe maior penetração desta no leito, resultando em maior deformação do leito Δ' , e assim um

incremento no raio de captura de partículas. Do mesmo modo, quanto maior é a altura do leito h_l , e maior a resistência das partículas, mais restrição terá a bola para penetrar neste, e assim quebrar radialmente uma maior quantidade de partículas.

$$r_e = \left(\frac{15E}{16k_{Aço}} \right)^{1/5} d_b^{2/5} \quad \text{Eq. 2.10}$$

$$r_g = \sqrt{\left(\frac{d_b}{2} \right)^2 - \left[\frac{d_b}{2} - h_l \left(\frac{\Delta'}{h_l} \right) \right]^2} \quad \text{Eq. 2.11}$$

na qual Δ'/h_l é estimado mediante a Equação 2.12, na qual a_c , b_c e c_c , são constantes do modelo.

$$\frac{\Delta'}{h} = a_c \left[1 - \exp \left(-b_c \left(\frac{E}{E_{50}} \right)^{c_c} \right) \right] \quad \text{Eq. 2.12}$$

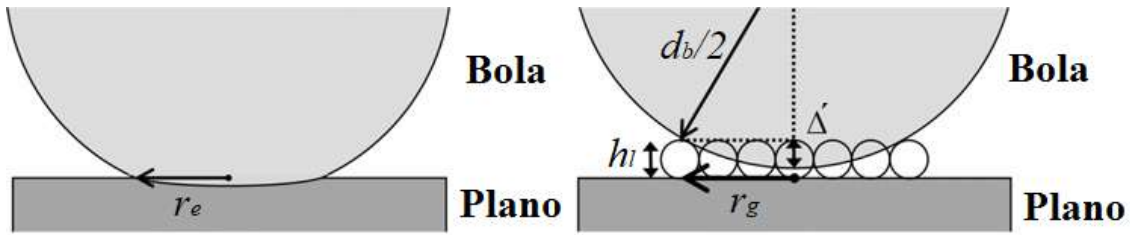


Figura 2.11. Ilustração das variáveis r_e e r_g (BARRIOS *et al.*, 2011).

No presente capítulo foram introduzidos alguns conceitos e analisados diversos estudos correspondentes ao estudo dos microprocessos de cominuição baseados em dados experimentais.

É importante destacar os trabalhos de SCHÖNERT (1996) e TAVARES (2007), já que oferecem uma útil estruturação que serve como base para direcionar o complexo estudo dos microprocessos, se estabelecendo como marcos de referência para o desenvolvimento de modelos de cominuição sólidos, e, em particular dos modelos virtuais de quebra de partículas do ambiente de simulação do Método dos Elementos Discretos.

2.3 Modelagem da quebra de partículas usando DEM

Existem diversos modelos matemáticos que representam de forma correta a realidade, os quais são baseados especificamente em informações obtidas experimentalmente. Nas últimas décadas as observações realizadas no laboratório constituíram o principal método de entendimento dos micro e macroprocessos de cominuição. Reconhecendo a importância da caracterização de partículas e a análise e entendimento dos microprocessos na geração de modelos de cominuição, cabe ressaltar que existem situações ou fenômenos em microescala que dificilmente podem ser entendidos e descritos a nível de laboratório. Um exemplo é o caso da distribuição de energias de colisão em um leito de partículas (LIU e SCHÖNERT, 1996). Essa distribuição depende fortemente das características dos materiais e do ambiente dentro dos equipamentos de cominuição, onde um grande número de partículas individuais com diferentes tamanhos, formas, e resistências, interagem, deformando, enfraquecendo ou quebrando sob diferentes condições de esforço, e, do mesmo modo gerando continuamente produtos com diversas distribuições de tamanhos. Assim, o processo de descrição quantitativa do fenômeno de quebra de partículas dentro de um sistema fechado é muito complexo, dado pela grande quantidade de cálculos que seriam necessários para abordar todas as variáveis. Contudo, as técnicas numéricas e os simuladores computacionais aparecem como uma poderosa alternativa que torna possível o desenvolvimento de aproximações que conseguem descrever muitas situações encontradas nos sistemas particulados.

Na parte introdutória deste capítulo foi contextualizada a extrema dificuldade de descrever a ruptura de um material geológico a partir da abordagem da mecânica da fratura e das relações microestruturais, devido à heterogeneidade característica deste tipo de materiais. Logo, foram apresentadas algumas das aproximações usadas para descrever a quebra e a fragmentação de partículas na ciência da cominuição por meio de diversas relações e modelos matemáticos baseados em abordagens diferentes à mecânica da fratura, mas validados experimentalmente. Deste modo, na presente seção será apresentada uma alternativa que tem auxiliado amplamente o estudo da cominuição (WEERASEKARA *et al.*, 2013), permitindo a modelagem e simulação computacional de sistemas particulados, a qual é conhecida como o método dos elementos discretos, “*Discrete Element Method – DEM*”

2.3.1 Método dos Elementos Discretos

Na década de 1970, CUNDALL (1978), e CUNDALL e STRACK (1979) desenvolveram um modelo numérico para analisar problemas da mecânica de solos, o qual permitia a manipulação de partículas, descrevendo o seu comportamento mecânico a partir de arranjos de discos e esferas. Esta importante ferramenta, chamada nos seus primórdios de “Método dos Elementos Distintos”, permitia apenas simulações em duas dimensões e com poucos elementos (aproximadamente 1500). Atualmente conhecida como Método dos Elementos Discretos, a técnica permite simulações em três dimensões e com mais de um milhão de elementos. A técnica opera com base em um esquema numérico que analisa o movimento e as interações de partículas rígidas independentes, calculando suas posições individualmente (partícula por partícula) em cada intervalo de tempo.

O ciclo de cálculo usado pelo método alterna por um lado a aplicação da Segunda Lei de Newton, que dá o movimento da partícula a partir das forças atuantes e, por outro lado, a Lei de Força-Deslocamento, usada nos contatos entre entidades para encontrar as forças de contato em cada deformação. O método não modela a deformação da partícula, ao invés disso penaliza um valor, permitindo uma sobreposição entre as partículas nos pontos de contato (CUNDALL e STRACK, 1979). A magnitude desta medida está relacionada diretamente à força de contato. A seguir são apresentadas as equações usadas para calcular o movimento da partícula, em termos de translação (Equação 2.13) e de rotação (Equação 2.14):

$$m_i \frac{d}{dt} v_i = \sum_j (F_{ij}^n + F_{ij}^t) + m_i g \quad \text{Eq. 2.13}$$

$$I_i \frac{d}{dt} \omega_i = \sum_j (R_i \times F_{ij}^t - \mu_r R_i |F_{ij}^n| \omega_i) \quad \text{Eq. 2.14}$$

Nas quais v_i , ω_i , I_i , m_i são, respectivamente, as velocidades translacional e angular, o momento de inércia, e massa da partícula; g e μ_r correspondem, respectivamente, à aceleração da gravidade e o coeficiente do atrito de rolamento; R_i é o vetor que vai desde o centro da partícula até o ponto de contato, o qual tem a magnitude do raio da partícula. F_{ij}^n , F_{ij}^t correspondem respectivamente, às forças de contato normal e tangencial

impostas sobre a partícula i pela partícula j , tal como representado na Figura 2.12 (ZHU *et al.*, 2007).

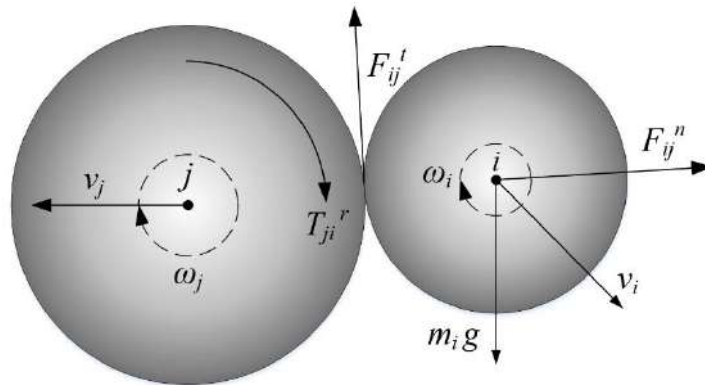


Figura 2.12. Ilustração das forças atuando sobre a partícula i pela partícula j .

2.3.1.1 Modelos de contato usados em DEM

A força de contato entre partículas está diretamente influenciada pelo modelo de contato usado. Assim, numa dada interação de dois elementos, estes podem se deformar elasticamente ou até elastoplasticamente. Do mesmo modo, nestes pode definir-se uma repulsão ou uma atração. Algumas das aproximações usadas para descrever esta interação entre elementos são os modelos de Hertz-Mindlin, Histerese Linear, Coesão Linear, entre outros. Considerando a sua relevância e aplicação na presente pesquisa, a seguir serão apresentados em detalhe um modelo de interação elástica (Hertz-Mindlin) e um modelo de interação elastoplástica (Histerese Linear).

2.3.1.2 Modelo de Hertz - Mindlin

O Modelo de Hertz-Mindlin é um dos modelos mais comumente usados em DEM, sendo um modelo padrão de alguns simuladores, tal como no software EDEM (DEM SOLUTIONS INC, 2016). Este é um modelo de interação elástica que apresenta duas componentes: um modelo para o cálculo da relação força – deslocamento, baseado na teoria de contato de Hertz (HERTZ, 1882), e um modelo para o cálculo da relação força-deslocamento tangencial baseado no trabalho de MINDLIN (1949) e MINDLIN e DERESIEWICZ (1953). Na Figura 2.13 se ilustra o modelo Hertz-Mindlin (TSUJI *et al.*, 1992) para o contato das partículas i e j . Neste, observa-se o sistema mola-amortecedor para a componente normal e tangencial, juntamente ao componente de atrito tangencial.

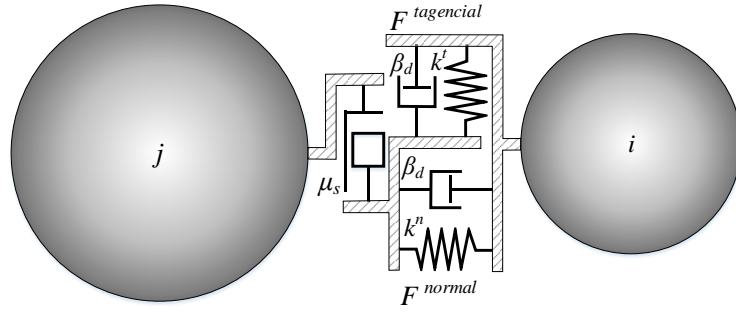


Figura 2.13. Ilustração simplificada do modelo de contato Hertz-Mindlin com escorregamento

2.3.1.2.1 Cálculo da componente normal da força de contato – F^n

No contato de duas esferas, como as descritas na Figura 2.13, o cálculo da componente normal da força de contato F^n é dado pela soma da força normal da mola - F^{ns} e a força normal do amortecedor F^{nd} :

$$F^n = F^{ns} + F^{nd} \quad \text{Eq. 2.15}$$

F^{ns} e F^{nd} são calculados a partir das Equações 2.16 e 2.17, respectivamente:

$$F^{ns} = -K_n \cdot U_n^{3/2} \quad \text{Eq. 2.16}$$

$$F^{nd} = -2 \sqrt{\frac{5}{6}} \beta_d \sqrt{m^* \cdot k_n} \cdot v_{rel}^n \quad \text{Eq. 2.17}$$

Nas quais U_n é o deslocamento normal do contato (sobreposição), v_{rel}^n é a velocidade normal relativa (desde a esfera i à esfera j), e β_n é a razão de amortecimento. A constante do contato do Hertz K_n e a rigidez normal k_n são dadas pelas Equações 2.18 e 2.19:

$$K_n = \frac{4G\sqrt{r^*}}{3(1-\nu')} \quad \text{Eq. 2.18}$$

$$k_n = \frac{2G}{(1-\nu')} \left[\frac{3}{4} \frac{(1-\nu')r^* \cdot F^{ns}}{G} \right]^{1/3} \quad \text{Eq. 2.19}$$

Nas quais G e ν' são, respectivamente, o modulo de cisalhamento e a razão de Poisson. Os termos m^* e r^* são, respectivamente, a massa e raio equivalente, dadas pelas Equações 2.20 e 2.21:

$$m^* = \frac{m_i \cdot m_j}{m_i + m_j} \quad \text{Eq. 2.20}$$

$$r^* = \frac{r_i \cdot r_j}{r_i + r_j} \quad \text{Eq. 2.21}$$

Nas quais m_i e m_j correspondem respectivamente, à massa das esferas i e j ; e r_i e r_j , respectivamente, o raio das esferas i e j .

2.3.1.2.2 Cálculo da componente tangencial da força de contato F^t

O cálculo da componente tangencial é dado da mesma forma que a componente normal, ou seja, somando a força tangencial da mola F^{ts} e a força tangencial do amortecedor F^{td} , tal como apresentado na Equação 2.22:

$$F^t = F^{ts} + F^{td} \quad \text{Eq. 2.22}$$

F^{ts} é expresso na forma incremental mediante a Equação 2.23, na qual o valor de $F^{ts}_{(n-1)}$ corresponde à força da mola no intervalo de tempo (*time step*) precedente e ΔF^{ts} ao incremento na força tangencial da mola, calculada por meio da Equação 2.23 (CHUNG, 2006):

$$\Delta F^{ts} = k_t \cdot \Delta U_t \quad \text{Eq. 2.23}$$

Na qual k_t e U_t , são a rigidez tangencial do contato e o deslocamento tangencial do contato dados pelas Equações 2.24 e 2.25, respectivamente:

$$k_t = \frac{2}{(2 - \nu)} [6(1 - \nu)G^2 \cdot r^* \cdot F^{ns}]^{1/3} \quad \text{Eq. 2.24}$$

$$\Delta U_t = v_{rel}^t \cdot \Delta t \quad \text{Eq. 2.25}$$

Nas quais v_{rel}^t é a velocidade tangencial relativa e Δt o intervalo de tempo (*time step*). A força tangencial de amortecimento F^{td} é calculada mediante a Equação 2.26:

$$F^{td} = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta_d \sqrt{m^* \cdot k_n} \cdot v_{rel}^n \quad \text{Eq. 2.26}$$

No modelo Hertz-Mindlin sem escorregamento (*No-Slip*) há uma restrição física no contato, dada pela Lei de Atrito de Coulomb ($\mu_s F^{ns}$), em que μ_s é o coeficiente de

atrito estático. A situação apresenta-se quando a componente da força tangencial F^t excede a força de cisalhamento máxima permitida pelo deslizante de atrito (*Slider*). Neste caso, o valor de F^t é ajustado ao valor do atrito máximo, dado pela Equação 2.27:

$$|F^t| \leq \mu_s F^{ns} \quad \text{Eq. 2.27}$$

O cálculo da razão de amortecimento β_d é dado pela Equação 2.28, a qual apresenta uma relação com o coeficiente de restituição e (TSUJI *et al.*, 1992):

$$\beta_d = \frac{\ln e}{\sqrt{(\ln e)^2 + \pi^2}} \quad \text{Eq. 2.28}$$

2.3.1.3 Modelo de contato elasto-plástico

O modelo aqui descrito faz referência à implementação realizada para o modelo de contato do *software* Rocky (ROCKY DEM, 2014), o qual foi construído a partir do modelo Histerese Linear, dado para a descrição da componente da força normal do contato; e um modelo elástico com atrito (*Elastic-Frictional*), usado para a componente da força tangencial do contato.

2.3.1.3.1 Componente Normal: Modelo de Histerese Linear

O modelo de Histerese Linear é um modelo de contato de deformação elasto-plástica, em que os elementos se comportam de forma elástica até um esforço crítico dado, a partir do qual apresentam deformação plástica. Detalhes do modelo podem ser encontrados no trabalho de WALTON e BRAUN (1986). Considerando a natureza não deformável das partículas em DEM, o resultado da deformação é visto como uma sobreposição entre os elementos. Vale ressaltar que a componente normal não apresenta um termo de amortecimento. Na Figura 2.14 ilustra-se a relação de força-deslocamento no modelo de histerese linear. Nesta observa-se que a diferença desse com os modelos meramente elásticos (*p.ex.* Hertz-Mindlin). Neste modelo, no descarregamento a força vai até zero, mas, deixando uma sobreposição residual U_o , a qual representa a deformação plástica. Considerando que a partícula foi deformada por meio do carregamento de declive k_1 e descarregamento de declive k_2 , um carregamento posterior irá seguir o declive k_2 . A força normal nestas situações é dada pelas Equações 2.29 e 2.30:

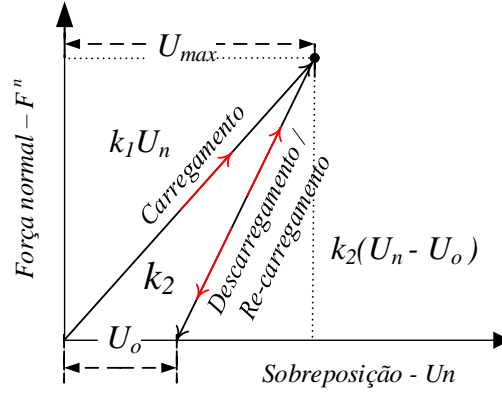


Figura 2.14. Ilustração da relação força – deslocamento para o modelo de histerese linear dado para a componente normal da força

$$F^n = \min (F_o^n + k_2 \cdot \Delta U_n, k_1 \cdot U_n) \quad \text{se } \Delta U_n \geq 0 \quad \text{Eq. 2.29}$$

$$F^n = \max (F_o^n + k_2 \cdot \Delta U_n, 0,001 \cdot k_1 \cdot U_n) \quad \text{se } \Delta U_n < 0 \quad \text{Eq. 2.30}$$

Sendo ΔU_n a mudança na sobreposição normal do contato durante o tempo, assumindo que o valor é positivo quando duas partículas i e j se aproximam, e negativo, quando se afastam. Esta mudança é calculada usando a Equação 2.31:

$$\Delta U_n = U_n - U_o \quad \text{Eq. 2.31}$$

Na qual F^n e F_o^n são a força elastoplástica do contato normal no instante de tempo t e $t-dt$, respectivamente, onde o dt é o passo de tempo. Entretanto, k_1 e k_2 são, respectivamente, os valores da rigidez de carregamento e descarregamento no contato. É importante observar que o valor da rigidez de descarregamento está limitado pelo valor de $0,001 \cdot k_n \cdot U_n$, assegurando-se assim que a força permaneça em zero na sobreposição zero. O cálculo da rigidez de carregamento e descarregamento é dado pelas Equações 2.32 e 2.33:

$$k_1 = \frac{k_{1_i} \cdot k_{1_j}}{(k_{1_i} + k_{1_j})} \quad \text{Eq. 2.32}$$

$$k_2 = \frac{k_1}{e^2} \quad \text{Eq. 2.33}$$

sendo k_{l_i} e k_{l_j} a rigidez das partículas i e j , respectivamente, calculados por meio da Equação 2.34, na qual Y e d_i correspondem ao módulo elástico (Módulo de Young) e ao tamanho da partícula, respectivamente:

$$k_{l_p} = Y \cdot d_i \quad \text{Eq. 2.34}$$

2.3.1.3.2 Componente Tangencial: Modelo elástico com atrito

O cálculo da componente tangencial da força de contato F^t é realizado pela Equação 2.35, no caso em que não se apresente escorregamento no contato; e pela Equação 2.36, no caso em que se apresente escorregamento no contato. Este ocorre quando a força tangencial excede o limite de $\mu_s \cdot F^n$. Deste modo, quando a força tangencial é inferior ($\mu_d \cdot F^n$), o contato é considerado não escorregadio.

$$F^t = \min(F_0^t + k_1 \cdot \Delta U_t, \mu_s \cdot F^n) \quad \text{Eq. 2.35}$$

$$F^t = \min(F_0^t + k_1 \cdot \Delta U_t, \mu_d \cdot F^n) \quad \text{Eq. 2.36}$$

sendo F_0^t a força elastoplástica do contato normal no instante de tempo $t-dt$; ΔU_t é o deslocamento tangencial relativo da partícula durante o tempo, e μ_s e μ_d os coeficientes de atrito estático e dinâmico, respectivamente.

2.3.2 Modelos de quebra de partículas em DEM

Os desenvolvimentos teóricos em torno do Método dos Elementos Discretos têm contribuído enormemente na pesquisa em diversas áreas de estudo relacionadas aos sistemas particulados. ZHU *et al.* (2007, 2008) revisaram os trabalhos conduzidos em sistemas particulados usando DEM: No primeiro, foram revisados os desenvolvimentos teóricos associados, ressaltando três aspectos: modelos para o cálculo das forças de interação entre elementos e fluido, acoplamento com a fluidodinâmica computacional, e a teoria relacionada na conexão da modelagem discreta à contínua. No segundo estudo, os autores revisaram as maiores aplicações e descobertas relacionadas, classificando-as em: empacotamento de partículas, fluxo de partículas, e fluxo de partículas-fluido. Por outro lado, as aplicações específicas do DEM na cominuição foram revisadas por

WEERASEKARA *et al.*, (2013), as quais tiveram seu início com o trabalho de MISHRA e RAJAMANI (1992).

O uso de elementos com formato esférico em DEM é o mais comum, devido à facilidade na busca dos contatos. No entanto, existem muitas outras aproximações e aplicações desenvolvidas com partículas com formato não-esférico, tal como é revisado por LU *et al.* (2015).

A descrição da quebra de partículas dentro do ambiente de simulação DEM inicialmente não era possível ou era limitada. No entanto, com o passar dos anos foram desenvolvidas aproximações para a quebra de partículas, as quais têm impactado fortemente as simulações de equipamentos, tornando-as mais realistas. Entre as aproximações para a quebra de partículas dentro do ambiente de simulação DEM são identificados três princípios amplamente usados: uso de ligações com propriedades mecânicas para união de esferas, uso de ‘fibras’ com propriedades mecânicas para ‘colagem’ de tetraedros, e uso da substituição de esferas ou tetraedros.

Diversas customizações em torno das duas primeiras aproximações que procuram uma melhor representação do fenômeno físico tem sido geradas, tal como descrito na revisão de LISJAK e GRASSELLI (2014), embora o custo computacional associado ainda limita sua aplicação e exatidão. Entretanto, a estratégia de substituição de elementos parece oferecer uma vantagem computacional e ainda um importante potencial de desenvolvimento. Na Figura 2.15 são ilustrados os modelos de quebra baseados nos princípios previamente descritos, assim como o modelo de partícula inquebrável. Na figura observa-se, para cada caso, o resultado do impacto das partículas contra uma determinada superfície. Na próxima seção será apresentada uma descrição detalhada destes modelos.

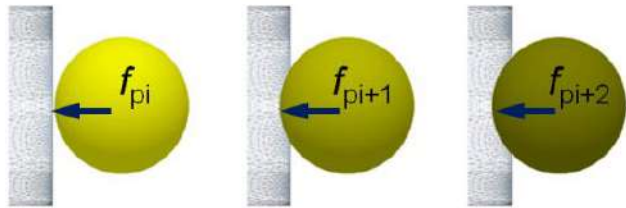
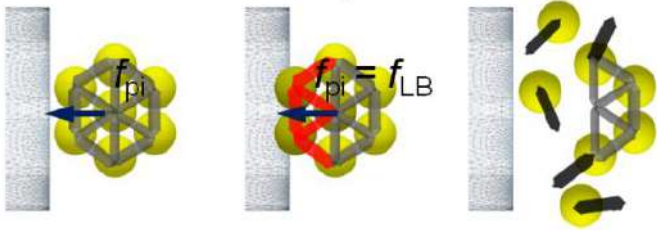
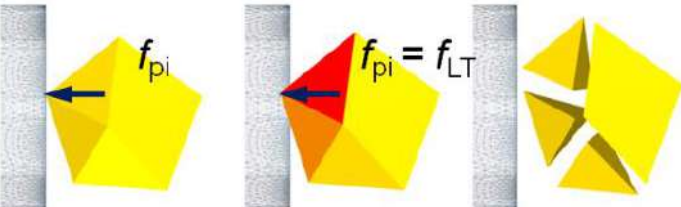
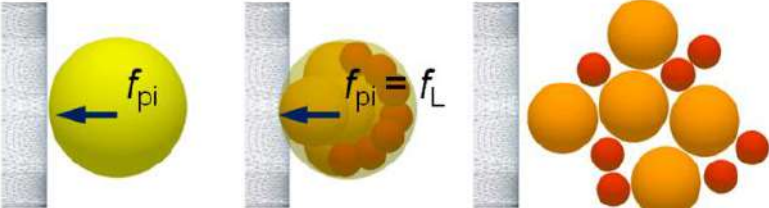
Partícula inquebrável	
Modelo de ligação de esferas	
Modelo de elementos tetraédricos	
Modelo de substituição de elementos	

Figura 2.15. Esquema representando as diferentes técnicas de quebra de partículas baseadas em DEM (BARRIOS, 2015).

2.3.2.1 Modelo de ligação de elementos

O modelo de ligação de elementos foi proposto por POTYONDY e CUNDALL (2004) como uma aproximação para descrever a quebra dentro do ambiente de simulação DEM. No modelo, o material sólido é representado como um pacote de elementos circulares em 2D ou esféricos em 3D, os quais são ligados nos seus pontos de ‘contato’ (Figura 2.16). No contato entre cada par de elementos (i e j) (Figura 2.17) existe uma resistência que pode ser de tipo tração, compressão ou flexão, a qual é representada por um ‘elemento’ (ligação) que age como o seu ‘cimentante’ e apresenta rigidez e resistência. Estas ligações são criadas num dado tempo entre cada par de esferas que apresentam uma proximidade mínima e quebram quando o valor crítico é excedido, sem a possibilidade de se formarem novamente. A proximidade mínima que deve existir entre um par de elementos i e j para que seja formada a ligação pode se denominar como

distância mínima de pseudo-contato, já que não é necessária a existência de um contato real. Segundo POTYONDY e CUNDALL (2004) uma ligação é formada quando existe uma separação menor que 10^{-6} vezes o raio médio dos dois elementos i e j .

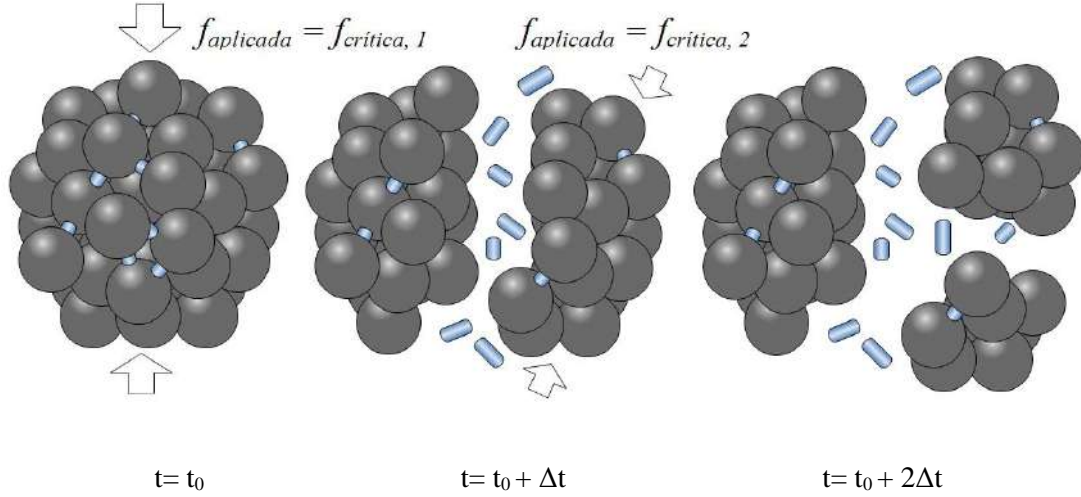


Figura 2.16. Esforço de partícula (aglomerado de esferas cimentadas com ligações) do BPM com força igual à força crítica de fratura.

Na colisão de uma partícula, denominada no modelo BPM como ‘metapartícula’, as esferas que a compõem interagem de acordo com o modelo de Hertz-Mindlin (WEERASEKARA *et al.*, 2013) antes de que sejam formadas as ligações, e depois que elas quebram. Deste modo, quando as ligações são criadas, as forças e torques entre esferas são ajustados progressivamente para as expressões de força e torque do modelo de ligação de elementos. Na Figura 2.17 são representadas as forças e momentos agindo sobre a ligação, a qual apresenta um comprimento L_l e raio R_l , definido este último pela esfera de menor tamanho no contato por meio da Equação 2.37:

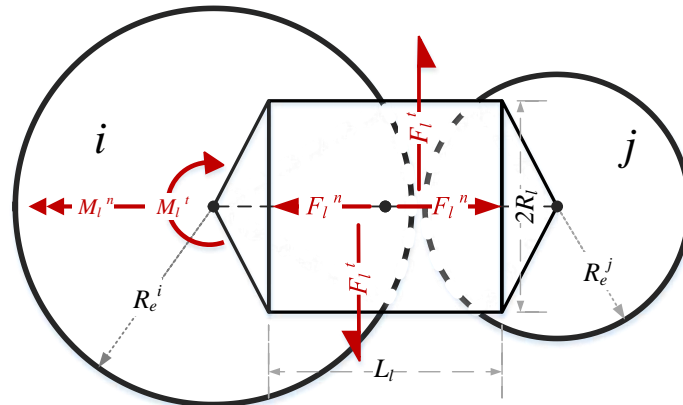


Figura 2.17. Ilustração das componentes de esforço atuando sobre a ligação que une duas esferas i e j no modelo de ligação de elementos.

$$R_l = \lambda \cdot \min(R_e^i + R_e^j) \quad \text{Eq. 2.37}$$

sendo λ o parâmetro conhecido como ‘multiplicador do raio da ligação’.

A força total agindo sobre a ligação (Equação 2.38) pode ser definida em função da componente normal F_l^n (Equações 2.39) e a componente tangencial F_l^t (Equação 2.40). A mudança destas componentes é dada de acordo com os incrementos subsequentes relativos dos deslocamentos normal ΔU_n (Equação 2.41) e tangencial ΔU_t (Equação 2.42) dados no tempo:

$$F_l = F_l^n + F_l^t \quad \text{Eq. 2.38}$$

$$\Delta F_l^n = -k_l^n \cdot A_l \cdot \Delta U_n \quad \text{Eq. 2.39}$$

$$\Delta F_l^t = -k_l^t \cdot A_l \cdot \Delta U_t \quad \text{Eq. 2.40}$$

$$\Delta U_n = v^n \cdot \Delta t \quad \text{Eq. 2.41}$$

$$\Delta U_t = v^t \cdot \Delta t \quad \text{Eq. 2.42}$$

Sendo k_l^n e k_l^t a rigidez da ligação normal e tangencial, respectivamente. Os valores de v^n , v^t são as velocidades normal e tangencial, respectivamente. A variável ‘ A_l ’ corresponde à área da seção transversal da ligação (Equação 2.43):

$$A_l = \pi \cdot R_l^2 \quad \text{Eq. 2.43}$$

O cálculo do momento total (Equação 2.44), do mesmo modo, está definido pela componente normal M_l^n (Equação 2.45) e pela componente tangencial M_l^t (Equação 2.46). A mudança destas componentes é dada de acordo com as rotações normal $\Delta \theta_n$ (Equação 2.47) e tangencial $\Delta \theta_t$ (Equação 2.48) dadas no tempo:

$$M_l = M_l^n + M_l^t \quad \text{Eq. 2.44}$$

$$\Delta M_l^n = -k_l^n \cdot J \cdot \Delta \theta_n \quad \text{Eq. 2.45}$$

$$\Delta M_l^t = -k_l^n \cdot I \cdot \Delta \theta_n \quad \text{Eq. 2.46}$$

$$\Delta \theta_n = \omega^n \cdot \Delta t \quad \text{Eq. 2.47}$$

$$\Delta \theta_t = \omega^t \cdot \Delta t \quad \text{Eq. 2.48}$$

sendo ω^n , ω^t as velocidades angulares normal e tangencial respectivamente. As variáveis ‘ J ’ e ‘ I ’ correspondem, respectivamente, ao momento de inércia (Equação 2.49) e momento polar de inércia (Equação 2.50) da seção transversal da ligação:

$$J = \frac{1}{2} \pi \cdot R_l^4 \quad \text{Eq. 2.49}$$

$$I = \frac{1}{4} \pi \cdot R_l^4 \quad \text{Eq. 2.50}$$

A ruptura é definida mediante o valor máximo da tensão agindo no contato normal σ_{max} e tangencial τ_{max} , tal como se apresenta nas Equações 2.51 e 2.52, respectivamente:

$$\sigma_{max} = \frac{F_l^{n,Total}}{A} + \frac{2M_l^n}{J} R_l \quad \text{Eq. 2.51}$$

$$\tau_{max} = \frac{F_l^{s,Total}}{A} + \frac{2M_l^s}{J} R_l \quad \text{Eq. 2.52}$$

Quando $\sigma_{max} \gg \sigma_c$ ou $\tau_{max} \gg \tau_c$, o contato paralelo rompe, sendo σ_c e τ_c as resistências normais e tangencial da ligação.

Deste modo, as características da ligação são definidas por cinco parâmetros: rigidez normal (tensão deslocamento) k_l^n , rigidez tangencial (tensão deslocamento) k_l^t , resistência critica normal (tensão), resistência critica tangencial (tensão) e o multiplicador do raio da ligação λ .

2.3.2.2 Modelos de elementos tetraédricos

Os modelos de elementos tetraédricos são definidos no presente trabalho de forma geral como aqueles que usam elementos geométricos não esféricos. A simples definição descrita aplica para aquelas aproximações que usam a quebra gradual, tal como nos trabalhos de POTAPOV e CAMPBELL (1994 e 1996) para 2D e 3D, respectivamente, e

para aquelas aproximações que usam a quebra instantânea, tal como no trabalho de POTAPOV *et al.* (2007). Descrever o processo de quebra mediante elementos tetraédricos foi proposto inicialmente por POTAPOV e CAMPBELL (1994). Tal aproximação oferece realismo na representação das partículas, permitindo a conservação da massa após o evento de quebra, contrário aos modelos que usam esferas, tal como o modelo de ligação de elementos (POTYONDY e CUNDALL, 2004). No modelo, o material sólido é representado como uma partícula de múltiplas facetas triangulares (Figura 2.18). Nesta figura também é ilustrado um conjunto de fragmentos gerados no evento de fratura e fratura subsequente, quando a força normal aplicada sobre o sólido é igual à força crítica de ruptura (Figura 2.18).

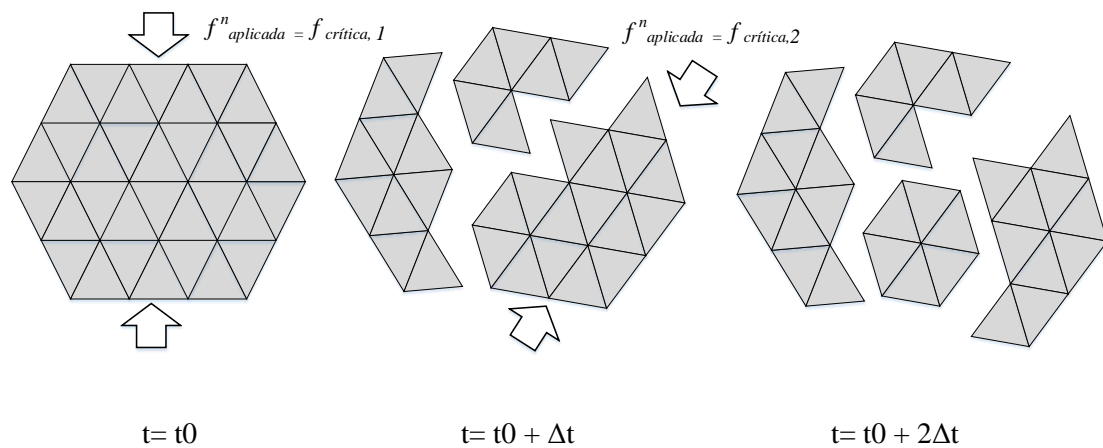


Figura 2.18. Representação em duas dimensões do esforço de partícula do modelo de elementos tetraédricos em duas dimensões (triângulos elementares) com força igual à crítica de fratura e a fragmentação resultante.

Na aproximação para a quebra gradual (Figura 2.18), a partícula descrita é conformada por um pacote de elementos tetraédricos sólidos, que são inquebráveis e indeformáveis, os quais estão ‘cimentados’ nos seus pontos de contato. A união entre cada par de elementos i e j pode ser vista em duas dimensões como uma ‘fibra’ elástica, a qual apresenta rigidez tanto na direção normal, quanto na tangencial. Do mesmo modo, as forças agindo sobre cada fibra apresentam uma componente normal e uma cisalhante, as quais são dadas pelo produto da rigidez e o deslocamento correspondente para cada componente. A resistência de cada fibra é definida usando um critério de esforço limite o qual, sendo superado, a fibra rompe, sendo criada uma trinca no seu lugar. Nesta aproximação cada elemento pode experimentar dois tipos de contato, os relacionados com

a fibra (internos na partícula) e com a colisão com outros elementos. De forma geral, as características desta aproximação oferecem a representação de propriedades mecânicas, sendo similar à proposta de POTYONDY e CUNDALL (2004) para elementos esféricos ligados. Uma descrição detalhada do modelo pode ser encontrada em POTAPOV *et al.* (1995).

Entretanto, na aproximação para a quebra instantânea usando tetraedros, a partícula original facetada é considerada um elemento sólido indeformável. Assim, a fratura ocorre por meio de um processo de “substituição de elementos mãe por um conjunto de elementos filhos (fragmentos)”, os quais apresentam formato irregular (tetraedros) e conservam a massa da partícula mãe. Nesta aproximação a quebra ocorre de forma instantânea, não dando lugar à descrição de propriedades mecânicas no processo. Vale ressaltar que nestes modelos é possível a fratura subsequentemente dos fragmentos da quebra primária.

2.3.2.2.1 Modelo de quebra instantânea do software Rocky

O modelo de quebra inserido no *software* Rocky[®] versão 3.11 (ROCKYINC, 2015) corresponde a uma aproximação para descrever a quebra instantânea. A implementação usa o algoritmo de Voronoi para subdivisão (fratura) das partículas solidas em 3D nos diferentes fragmentos filhos. Este algoritmo é bem conhecido na indústria dos *videogames* (CAMARDA, 2016), em que a fratura é dada mediante uma subdivisão do sólido de forma aleatória ou predefinida. Tal como descrito em uma comunicação técnica da empresa ESSS desenvolvida por Potapov e Donohue (ROCKYINC, 2015), o modelo usa como base para a subdivisão das partículas sólidas o algoritmo de Voronoi, baseado no modelo de probabilidade de fratura do VOGEL e PEUKERT (2005) (Equação 2.4) e o modelo de t_{10} do SHI e KOJOVIC (2007) (Equação 2.8). As componentes descritas foram propostas para serem usadas no modelo de quebra dentro do ambiente de simulação DEM por parte de MORRISON *et al.* (2007).

O *software* Rocky[®] usa a distribuição de Gaudin-Schuhmann para a construção da curva completa de distribuição de tamanhos de partícula, sendo possível a determinação de um ponto na curva de distribuição de tamanhos usando o modelo t_{10} . Uma consideração semelhante da literatura pode ser vista no trabalho de IMAGIRE *et al.* (2009), a qual faz uso do algoritmo de Voronoi e da distribuição Gaudin-Schuhmann.

Além dos parâmetros relacionados com o modelo t_{10} para descrever a intensidade da fragmentação, o usuário define o tamanho limite mínimo da partícula filha.

2.3.2.3 Modelo de substituição de elementos

O modelo de substituição de elementos, conhecido como ‘*Particle Replacement Model – PRM*’ foi proposto por CLEARY (2001) como uma alternativa para descrever a quebra de partículas dentro do ambiente de simulação DEM de forma computacionalmente mais eficiente, quando comparada com outras aproximações de alto custo computacional usadas na época (POTAPOV e CAMPBELL, 1994; THORNTON *et al.*, 1995) para 2D e (POTAPOV e CAMPBELL, 1996; THORNTON *et al.*, 1999) para 3D.

O PRM é um modelo de quebra instantânea, em que a partícula sólida é representada por uma esfera indeformável que é retirada da simulação no momento da fratura, substituindo-a por elementos filhos com identidades diferentes. É importante considerar que mais do que um modelo de fratura de partículas, o modelo proposto é um artifício para representar a quebra e fragmentação de partículas. Evidentemente, o modelo de PRM é menos realista comparado com outros modelos. Contudo, a distribuição de partículas usada e a incorporação de outras características da quebra de partículas podem contribuir para que o mesmo seja mais representativo da realidade física.

Considerando a sua particularidade, neste modelo não existem fibras ou ligações que favoreçam a representação de propriedades mecânicas. Sendo assim, os elementos podem interagir entre eles mediante um único modelo de contato (Hertz-Mindlin, Histerese Linear, ou outro) que vai definir a relação força-deslocamento. A força ou energia total agindo sobre a partícula em cada intervalo de tempo será registrada e comparada com o esforço crítico de ruptura definido pelo usuário. Assim, se as forças que agem sobre a partícula excedem a resistência crítica predefinida, a partícula mãe será substituída por uma distribuição de partículas filhas, a qual também pode ser predefinida pelo usuário e será disposta de forma empacotada dentro dos limites do contorno da esfera mãe. Uma das limitações que cabe ressaltar neste modelo reside na não conservação de massa após a fratura, já que os elementos filhos gerados na fratura são também esféricos como a partícula mãe. Entretanto, o recurso de usar uma sobreposição entre as esferas filhas no instante da substituição, entre outras estratégias, tem contribuído positivamente

na conservação da massa. Na Figura 2.19 é ilustrada a fratura por meio do modelo de substituição de elementos. Neste se observa que quando um elemento ' i_m ' é comprimido contra outro corpo até a ruptura, ele substitui por um conjunto de elementos $i_{f,i}$.

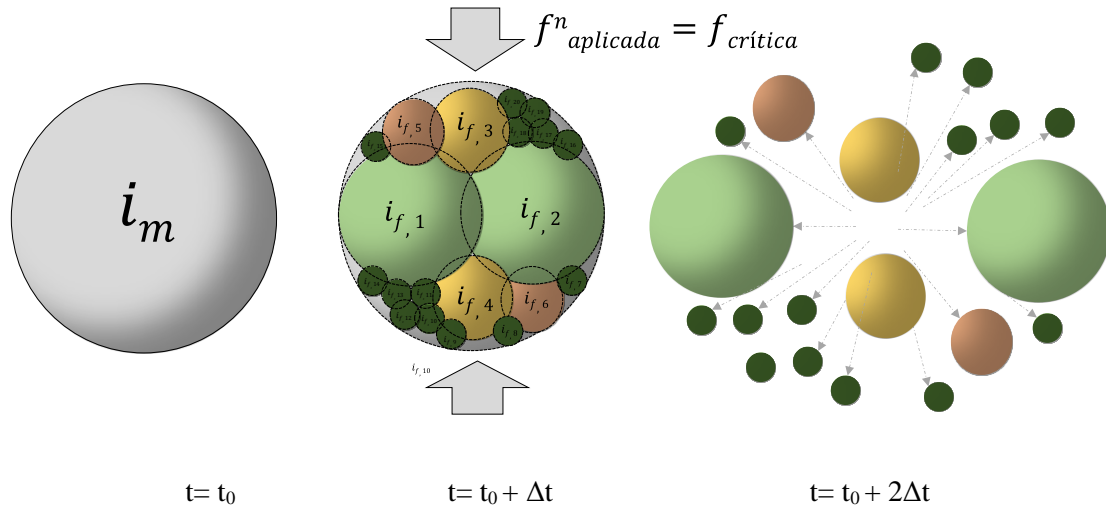


Figura 2.19. Ilustração do modelo de substituição de elementos usando no Método dos Elementos Discretos – DEM.

Embora, a filosofia geral do modelo se baseia na substituição de partículas quando é atingido o critério de fratura, algumas variantes do mesmo podem ser encontradas na literatura, tal como descrito na seção 2.3.3.3 deste capítulo.

Vale ressaltar que, embora simplista, o modelo de substituição de elementos oferece um potencial destacado de desenvolvimento e um custo computacional favorável, o que permitiria o desenvolvimento de simulações de equipamentos de mineração que requerem de um grande número de partículas.

2.3.2.3.1 Modelo de substituição de elementos do Software EDEM

Este modelo se encontra disponível na versão 2.72 para a interface de programação de aplicação '*Application Programming Interface – API*'. A versão descrita é baseada no modelo de contato Hertz-Mindlin, acoplado com a rotina de substituição de elementos. A rotina *API*, desenvolvida em código C++ por BARRIOS *et al.* (2015), apresenta três versões com diferentes características. Uma característica que identifica todas as versões é a locação das partículas filhas dentro do domínio espacial da partícula

mãe considerando uma sobreposição dada, tal como se ilustra na Figura 2.19 (centro). Vale ressaltar que a localização específica das partículas filhas dentro desta região é realizada de forma aleatória nas diferentes versões descritas.

Considerando as particularidades do modelo Hertz-Mindlin, a sobreposição (penalização) entre as partículas filhas produz uma “força de contato normal f_{Ni} ” elevada, fazendo instável a simulação. Para contornar esse problema, foi inserido o parâmetro b_L no modelo, o qual restringe a porcentagem de força de sobreposição das partículas, tal como descrito na Equação 2.53:

$$f_{N,i+1} = f_{N,i} \cdot b_L \quad \text{Eq. 2.53}$$

As características do modelo de substituição de elementos para uso no software EDEM desenvolvido por BARRIOS *et al.* (2015) são:

- Resistencia crítica de fratura da partícula $i - \sigma_{c(prm),p}$
- Razão do raio das partículas filhas i em relação à partícula mãe – $\varphi_{F,p}$
- Número de partículas filhas i /classe $j - N_p$
- Porcentagem da força de sobreposição de partículas filhas b_L
- Velocidade das partículas filhas após sua substituição – $v_{L,p}$
- Razão do raio limite inferior de partícula – $\varphi_{L,p}$

A versão ‘V2’ foi a primeira versão funcional do modelo de substituição proposta. Nesta versão, existe um valor constante para a força crítica de substituição das partículas, o qual é invariável em diferentes classes de tamanhos, ou seja, independentemente do tamanho, todas as partículas fraturaram sob a mesma condição de esforço. A segunda característica desta versão é a substituição simples, sem quebra subsequente de partículas, ou seja, quando uma partícula mãe fratura, as partículas filhas se tornam inquebráveis, sendo a distribuição de fragmentos pré-definida pelo usuário.

A segunda versão ‘V3’ considera o critério de força limite de substituição variante para cada classe de tamanho. Assim, por exemplo poderia ser atribuída maior resistência à fratura (força) de partícula quanto maior é o tamanho desta. Esta versão se caracteriza por permitir a quebra subsequente de partículas, ou seja, os fragmentos filhos do primeiro evento de fratura podem ser quebrados novamente quando sujeitos a esforços

subsequentes, até onde seja permitido pelo valor de tamanho limite $\phi_{F,L}$ definido pelo usuário. Isto significa que aquelas partículas que atingem o critério de fratura são substituídas se as partículas filhas apresentam tamanhos iguais ou superiores ao tamanho mínimo limite, caso contrário serão inquebráveis e se manterão na classe original. Na Figura 2.20 é ilustrada a versão 'V2' e 'V3' do PRM com as suas particularidades para a quebra subsequente, sendo limitada na versão 'V2' e possível na 'V3'. Vale ressaltar que o modelo não considera a variabilidade dentro da classe de tamanho.

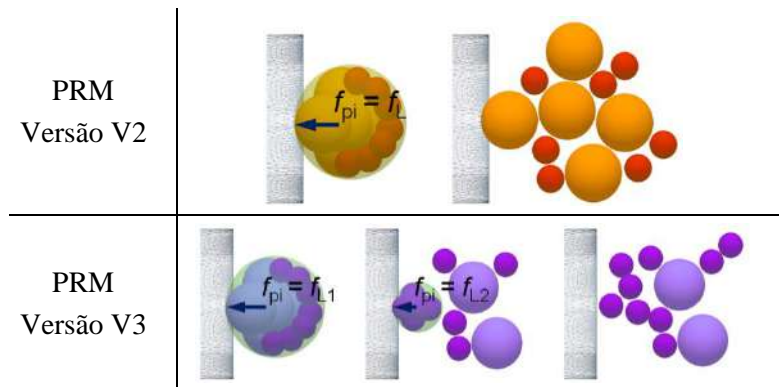


Figura 2.20. Esquema das versões V2 e V3 do modelo de substituição de elementos disponível como API no software EDEM. Adaptado de BARRIOS (2015).

O processo de fragmentação no modelo V3 pode ser definido em diferentes estágios. No primeiro estágio uma partícula mãe é carregada até a fratura, momento em que é substituída por um conjunto de partículas filhas preestabelecidas dentro dos parâmetros do modelo. As partículas resultantes deste evento são conhecidas como fragmentos da quebra primária. Um carregamento adicional sobre as partículas filhas gera a quebra subsequente das mesmas, sendo que as partículas filhas são substituídas por partículas com o padrão de partículas preestabelecido.

2.3.3 Aplicações dos modelos DEM de quebra de partículas na cominuição

Nesta seção serão apresentados exemplos de aplicações dos modelos de quebra dentro do ambiente de simulação DEM de processos de cominuição, seja para o estudo de partículas individuais, estudos de leitos de partículas, ou simulação de equipamentos de cominuição.

2.3.3.1 Aplicações do modelo de ligações de elementos na cominuição

O modelo de ligação de elementos tem sido amplamente usado e aplicado no estudo da fratura em materiais geológicos granulares em diversas áreas, tal como na área de engenharia civil, no estudo das propriedades do cimento (areia, concreto e rochas) (BROWN *et al.*, 2014; MCDOWELL e BONO, 2014a, 2014b). Recentemente tem sido também aplicado na área geotêxtil (ANNA *et al.*, 2016) para o estudo de estruturas deformáveis, tais como membranas, se mostrando muito promissora e versátil essa aplicação. Estas aplicações mostram a capacidade do BPM não só de representar a fratura de materiais, mas considerar algumas das suas propriedades mecânicas no processo.

A avaliação da fratura e propriedades mecânicas pode ser feita com base em corpos de prova submetidos a esforços, tal como se apresenta nas aplicações previamente citadas. Uma alternativa para o estudo de sistemas particulados em processos de cominuição é a avaliação inicial de partículas individuais, regulares ou irregulares por meio de ensaios de impacto ou compressão de partícula individual.

A avaliação da quebra por impacto foi feita por KHANAL *et al.* (2008) visando examinar a fragmentação de agregados esféricos individuais de alta resistência (partículas grossas) por meio de impactos contra uma superfície oblíqua. Isso também foi feito por SCHUBERT *et al.* (2005) que avaliaram o impacto de partículas grossas esféricas contra superfícies com diferentes configurações (Figura 2.21) fazendo uma comparação com resultados experimentais qualitativos e quantitativos. Por outro lado, METZGER e GLASSER (2012) estudaram o impacto de partículas com formato cúbico sobre superfícies oblíquas. Neste trabalho foi avaliado o efeito dos parâmetros do modelo PBM sobre a sua resposta na quebra, usando a medida denominada razão de dano dos aglomerados. Com base neste trabalho e por meio de aglomerados geometricamente cúbicos, posteriormente foi desenvolvido outro trabalho (METZGER e GLASSER, 2013), em que foi simulado um moinho de bolas avaliando diversas variáveis de operação sobre a quebra. Outros trabalhos de impacto de aglomerados individuais também foram realizados por ANTONYUK *et al.* (2006), THORNTON *et al.* (1999) e MISHRA e THORNTON (2001), entre outros.

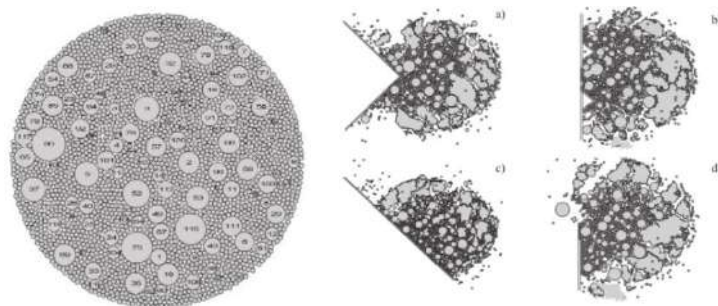


Figura 2.21. Área da seção transversal de bola de concreto modelada com diferentes materiais identificados com números (esquerda). Resultado do impacto de bola contra diferentes alvos: a, b, c, d (direita). Fonte: SCHUBERT *et al.* (2005).

Dentro dos estudos que representam os ensaios de tipo compressivo usando partículas individuais, se encontra o trabalho de SCHILDE *et al.* (2014) e o trabalho de DOSTA *et al.* (2016). No primeiro foi avaliada a deformação e quebra de estruturas agregadas compostas de nanopartículas de sílica mediante ensaios de nanoindentação de agregados individuais. Neste trabalho foram comparados os perfis força-deslocamento com medidas experimentais, encontrando boa concordância. No segundo, foram usados ensaios de compressão uniaxial para medir a deformação e quebra de granulados construídos a partir de micro-esferas de vidro. No trabalho foram produzidos experimentalmente granulados com diferentes microestruturas, os quais foram modelados virtualmente. Posteriormente foi realizada uma comparação da força e energia de fratura em cada caso (simulada e experimental) encontrando-se valores muito próximos entre si. Contudo, o autor não reportou curvas de força-deslocamento comparativas. Do mesmo modo SPETTL *et al.* (2015) avaliaram estatisticamente a influência da microestrutura de aglomerados esféricos de vidro sobre a sua fratura usando exclusivamente DEM. Isto foi feito por meio da simulação de ensaios de compressão uniaxial e avaliação do perfil força-deslocamento resultante. A variabilidade da microestrutura foi inserida por meio de um modelo estocástico que gera distribuições de esferas diferentes em cada aglomerado.

Nos trabalhos previamente descritos, os ensaios virtuais têm como base partículas de formato regular (esférico). Por outro lado, dada a complexidade de avaliar a fratura de partículas com formato irregular, vale mencionar o trabalho realizado por AFSHAR *et al.* (2017). Neste trabalho foi estudado o efeito do formato de partículas sobre a quebra por meio de ensaios de compressão de partículas individuais e leitos de partículas confinados.

O trabalho foi desenvolvido mediante ensaios experimentais de compressão de rochas de reciclagem da indústria da construção com diferentes formatos, as quais foram modeladas virtualmente para realizar os ensaios de compressão neste ambiente. Os resultados mostraram boa aderência das curvas experimental e simulada, tanto na compressão de partículas individuais, quanto de leitos de partículas (Figura 2.22)

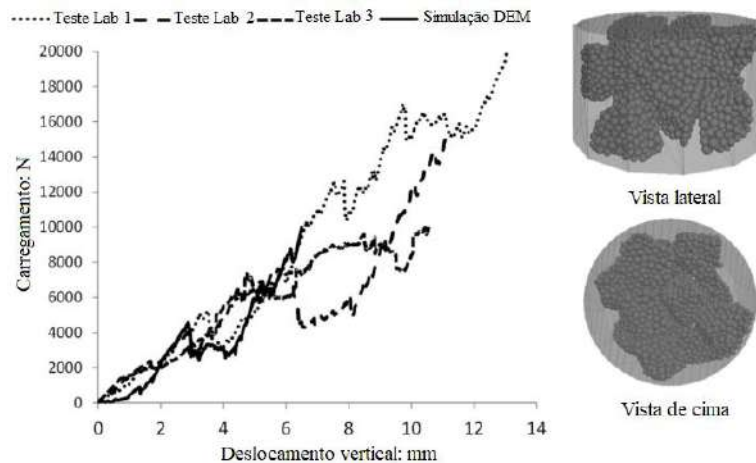


Figura 2.22. Resultados de laboratório e DEM de compressão de um arranjo de partículas. Fonte: AFSHAR *et al.* (2017).

São escassos estudos da quebra de partículas em leitos usando DEM, no entanto, a avaliação desta escala é fundamental para validar diversas propriedades (BARRIOS, 2010). O estudo da cominuição nesta escala mediante o uso do BPM é ainda incipiente, não sendo encontradas atualmente referências avaliando o impacto de leitos de partículas não confinadas. Entretanto, no estudo da quebra de leitos confinados encontra-se o trabalho de KHANAL *et al.* (2007) que estudaram por meio de DEM em 2D, auxiliado com o BPM, a cominuição de leitos de partículas (monodispersas) confinados por meio de ensaios de compressão num sistema de prensa e pistão. Aglomerados de esferas com tamanhos distribuídos foram usados para modelar as partículas, as quais apresentam formato esférico e diâmetro de $1/3$ do diâmetro do pistão. Os resultados mostraram que o leito de partículas rompe de forma distinta nas paredes e no interior, sendo as duas condições partícula-partícula e partícula-parede superfícies ativas para o crescimento das trincas. Encontrou-se também que a velocidade de aplicação dos esforços afetou o mecanismo de crescimento das trincas, sendo na maior velocidade, mais marcadamente quebradas primeiro as partículas das camadas superiores do leito (mais próximas à placa em movimento) e, posteriormente, as subsequentes.

Os trabalhos de simulação de equipamentos de cominuição usando o BPM podem se classificar em dois grupos: aqueles que usaram partícula única para estudar algumas propriedades dentro do equipamento e aqueles que usaram múltiplas partículas para a simulação integral do equipamento. Como exemplo do primeiro grupo se encontram os trabalhos de DJORDJEVIC *et al.* (2003) e REFAHI *et al.* (2010). No primeiro, foram usadas partículas individuais cúbicas (aglomerados de esferas) em britadores de impacto de eixo vertical (Figura 2.23) e horizontal, avaliando a cinética da partícula e o efeito da velocidade do rotor sobre a fragmentação; no segundo, foi usado o BPM para prever o comportamento na quebra e energia de fratura de partículas individuais de Granito e Calcário num britador de mandíbulas (Figura 2.24). Para isto foram modeladas partículas como um aglomerado de esferas no formato cúbico e esférico. Os resultados do trabalho, mediante a comparação experimental mostraram que o DEM/BPM é um método apropriado para modelar o modo de fratura das partículas de formato esférico, assim como prever a sua energia de fratura, não sendo apropriado para partículas de formato cúbico.

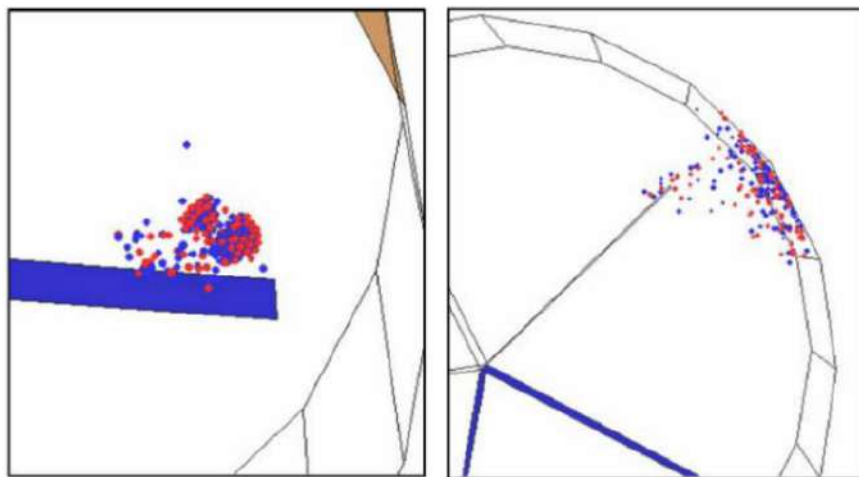


Figura 2.23. Processo de quebra de partículas num britador de impacto de eixo vertical: Partícula depois do impacto contra o impulsor (esquerda). Partícula depois do impacto contra a bigorna (direita). Fonte: DJORDJEVIC *et al.* (2003).

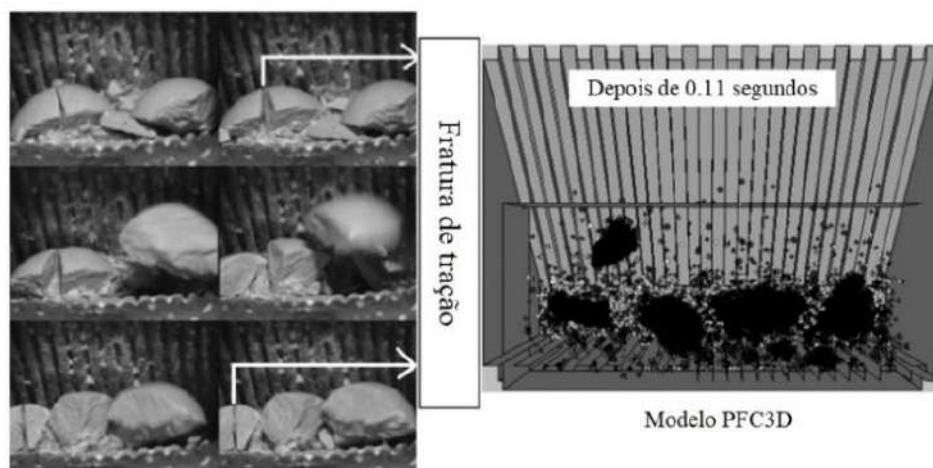


Figura 2.24. Progresso de fratura sequencial de esfera de calcário em britador de mandíbula (esquerda) e modelo DEM em uma etapa intermedia de britagem, vista de cima (direita). Fonte: REFAHI *et al.* (2010).

À exceção desses estudos, a simulação completa de equipamentos de cominuição por meio do BPM é ainda muito pouco desenvolvida, já que o custo computacional associado à simulação de partículas (aglomerados de esferas) numa quantidade razoável o impede. Dentro dos trabalhos que podem se destacar usando o BPM está o trabalho de QUIST e EVERTSSON (2016), em que foi simulada uma seção de um britador cônico (Figura 2.25); o trabalho de PATWA *et al.* (2016), em que foi simulado um moinho de rolos; e o já referenciado trabalho de METZGER e GLASSER (2013), em que foi simulado um moinho de bolas. No primeiro, foi simulada a britagem de rochas da indústria de agregados usando uma seção do equipamento (1/4 parte). Mediante um escâner 3D foi obtido o formato das partículas reais, o qual foi modelada usando uma distribuição de esferas bimodal. A calibração do material foi feita mediante ensaios virtuais de compressão uniaxial de discos cilíndricos (ensaio brasileiro). Os resultados simulados para distribuição de tamanho do produto, pressão hidrostática do equipamento e consumo energético mostraram alguma aderência com os resultados experimentais.

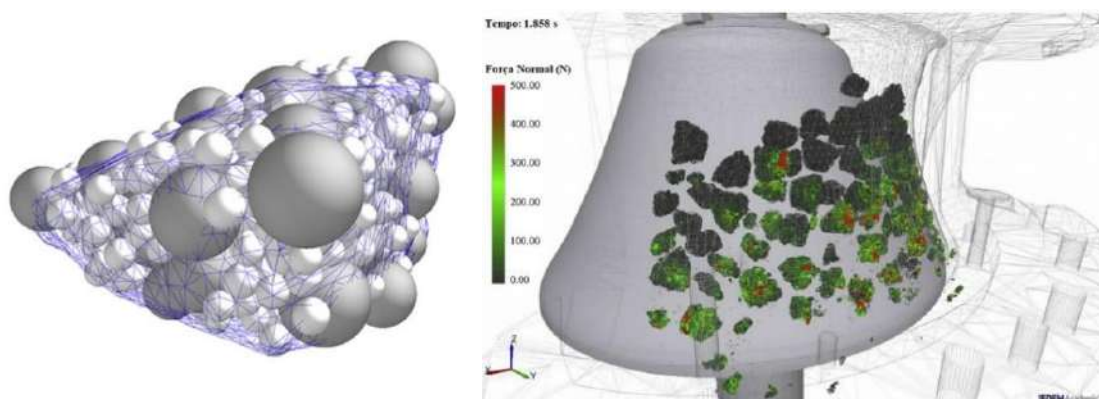


Figura 2.25. Simulação de seção de britador cônico com partículas do BPM. Fonte: QUIST e EVERTSSON (2016).

Por outro lado, no trabalho PATWA *et al.* (2016) foi simulada a moagem de trigo com diferentes umidades usando dois formatos de partícula. Os resultados mostraram que o modelo consegue descrever corretamente a tendência na mudança do tamanho de partícula de acordo com o conteúdo de umidade do trigo, comparado com resultados experimentais. No entanto o modelo apresenta um grande desvio na predição da distribuição do tamanho do produto.

2.3.3.2 Aplicações do modelo de elementos tetraédricos na cominuição

Dentro dos estudos da quebra de partículas individuais usando modelos de elementos tetraédricos se encontram o trabalho de POTAPOV e CAMPBELL (1994), os quais estudaram a quebra de partículas individuais com formato esférico (formada por triângulos), variando algumas propriedades do material, tal como o módulo de Young, coeficiente de Poisson e esforço para fratura. Os resultados mostraram que a distribuição de tamanhos do produto é fortemente dependente da energia de colisão. A extensão para 3D do modelo de quebra de duas dimensões do trabalho de POTAPOV *et al.* (1992) é apresentada em POTAPOV e CAMPBELL (1996) (Figura 2.26). Neste trabalho além de ser apresentado o modelo 3D, foi usado o ensaio de queda de uma esfera individual (formada por tetraedros) para comparar a distribuição de tamanhos do produto simulada com a experimental. Os resultados mostraram boa aderência entre as curvas, apresentando um desajuste dos finos. Outro trabalho que inclui quebra de partículas individuais foi desenvolvido por POTAPOV e CAMPBELL (1997b), cujo propósito foi examinar os

mecanismos que conduzem ao padrão de quebra por impacto. Este trabalho foi desenvolvido em duas dimensões mediante experimentos de queda de partículas com diferentes velocidades. Com base nos resultados das simulações conseguiu-se identificar dois mecanismos na fratura. O mecanismo I é dominante na aproximação da partícula à superfície de impacto até que o esforço a freia. O resultado é a propagação de trincas radialmente desde o ponto de contato para fora, gerando-se fragmentos de tipo alongado. Imediatamente, na restituição da partícula, são formadas trincas perpendicularmente às trincas do mecanismo I, as quais fazem referência ao mecanismo II, que são responsáveis pela geração de finos.

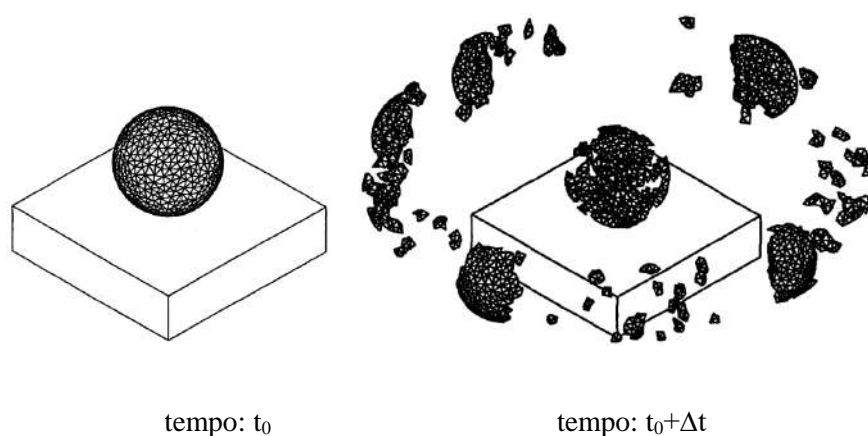


Figura 2.26. Processo de quebra de partícula modelada com modelo de elementos tetraédricos. Fonte: POTAPOV e CAMPBELL (1996)

Um trabalho muito relevante para a presente pesquisa foi desenvolvido por POTAPOV e CAMPBELL (2000), já que inclui a quebra de leitos de partículas não confinados, usando uma bola como impactor (Figura 2.27). Nesse trabalho, desenvolvido em duas dimensões e com base em partículas esféricas, foi estudado o efeito do atrito interparticular, o qual se mostrou responsável pelo maior consumo de energia disponível para a quebra. Contudo, a diminuição deste parâmetro não favorece a quebra de partículas no leito, já que ele também é responsável por manter as partículas coesas, permitindo a maior captura de partículas por parte do impactor, evitando a sua dispersão no espaço. Assim, no trabalho concluiu-se que um maior atrito resulta em quebra mais intensa, ainda sendo perdida maior energia cinética por parte do impactor durante a penetração do mesmo no leito de partículas. Outra importante descoberta foi observada no incremento do número de camadas no leito, encontrando-se que o aumento das camadas resulta em

menos partículas quebradas, sendo maior a energia perdida devido ao atrito interparticular e na forma de energia cinética das partículas dispersas.

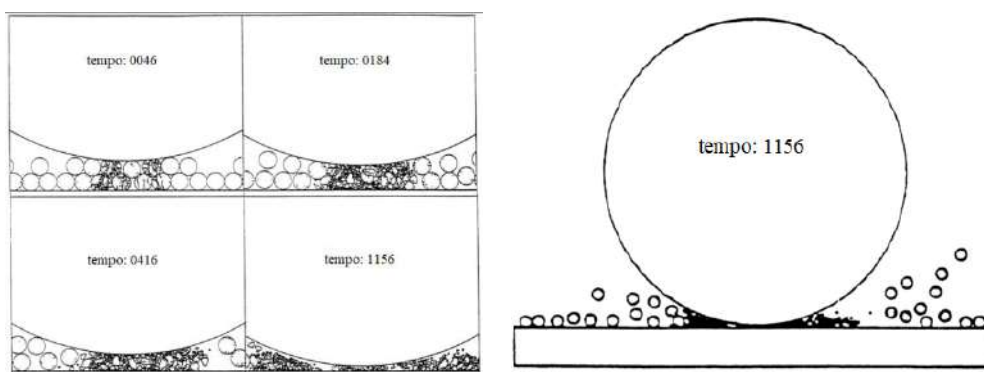


Figura 2.27. Simulação de impacto de leitos de partículas não confinados usando o modelo de elementos tetraédricos. Fonte: POTAPOV e CAMPBELL (2000).

PALUSZNY *et al.* (2015) propuseram um método de fragmentação em 3D baseado em elementos tetraédricos e o DEM, o qual foi aplicado em partículas individuais, esféricas e irregulares (discretizadas em tetraedros) e leitos de partículas esféricas confinados (Figura 2.28). A relevância do trabalho reside no uso de padrões de fragmentação baseados em observações experimentais e experimentos numéricos, os quais seguem a distribuição de Weibull como função do tamanho da partícula e a velocidade relativa do contato.

As referências de aplicações de modelos de elementos tetraédricos em equipamentos de cominuição são bastante escassas. Dentre os trabalhos que podem se encontrar está o desenvolvido por HERBST e POTAPOV (2004), em que foi usado o modelo de elementos tetraédricos proposto por POTAPOV *et al.* (1995) referido no trabalho como *Discrete Grain Breakage - DGB*, o qual foi adaptado para o uso com múltiplas partículas em equipamentos de cominuição. No trabalho foram apresentadas duas aplicações do modelo, incluindo um britador cônico e um moinho semi-autógeno. O propósito principal foi simular a quebra e prever algumas propriedades macroscópicas, tal como a distribuição de tamanhos do produto. Ainda que foram encontradas boa correspondência da simulação com os resultados experimentais, é importante ressaltar que foi feito um ajuste forçado da distribuição de tamanhos para partícula individual. O

ajuste descrito tem como base o desenvolvimento de experimentos virtuais de ensaios de queda de peso, mudando a energia de fratura da simulação até se atingir a distribuição de tamanhos alvo.

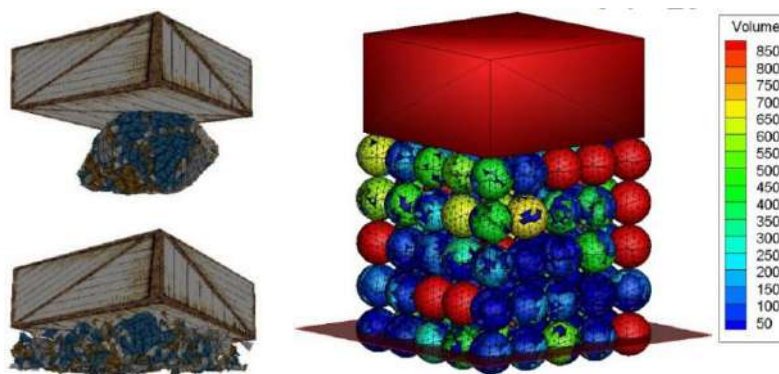


Figura 2.28. Sequência de fragmentação de partícula individual com formato (esquerda). Distribuição de fragmentos depois do carregamento de leitos de partículas esféricas confinadas (direita). Fonte: PALUSZNY *et al.* (2015).

Avaliando as fortes limitações computacionais do modelo DGB, devido a sua robustez, posteriormente POTAPOV *et al.* (2007) desenvolveram um modelo baseado em elementos tetraédricos, denominado *Fast Breakage Model - FBM*, o qual não considera a quebra gradual de fibras dentro da partícula (POTAPOV *et al.*, 1995), mas sim a quebra instantânea das partículas. O modelo foi aplicado como exemplo para a simulação de dois tipos de britadores cônicos por LICHTER *et al.* (2009) (Figura 2.29), que avaliaram a vazão de descarga e a distribuição de tamanhos do produto, mostrando boa aderência com os resultados experimentais. No trabalho foi truncada a fração fina de tamanhos devido à necessidade de restringir o tamanho mínimo de partícula, e com isso o número total de partículas na simulação.

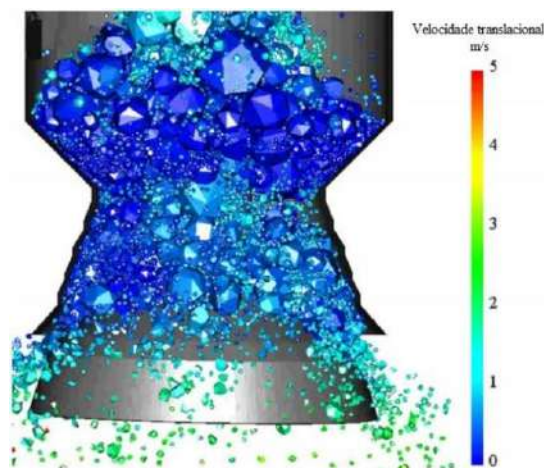


Figura 2.29. Simulação da quebra em britador cônico usando modelo de elementos tetraédricos. Fonte: LICHTER *et al.* (2009)

Além das referências apresentadas, existem outros trabalhos que usam também polígonos para simular a quebra, tendo como base DEM ou modelos híbridos DEM-FEM. Esses são os casos de respectivamente, o trabalho de HOSSEININIA e MIRGHASEMI (2006) e BAGHERZADEH-KHALKHALI *et al.* (2008), nos quais foram aplicados ensaios de compressão na caracterização da quebra de partículas minerais.

2.3.3.3 Aplicações do modelo de substituição de elementos na cominuição

O modelo de substituição de elementos tem sido amplamente explorado e usado em aplicações com sólidos granulados usados na geotecnia. A configuração de ensaios predominante nesta área são os testes de tipo compressivo sobre um leito confinado de partículas. Diversas modificações nas características do modelo envolvendo as leis que dominam a fratura, assim como a distribuição de partículas filhas (progênie) têm sido propostas por diversos autores. Por exemplo, ÅSTRÖM e HERRMANN (1998) investigaram em material granulado (discos elásticos) a fragmentação (modo de fratura) usando dois tipos de progênie. No modo 1, foram usados dois fragmentos, e no modo 2, 12 fragmentos. Os resultados da compressão do material granulado mostraram no modo de fratura 2 uma distribuição de grãos resultante com mais partículas grossas. Isto mostra que após gerados os primeiros fragmentos da fratura, os subsequentes esforços aplicados são distribuídos sob maior quantidade de partículas. Assim o esforço localizado sobre os grãos grossos é menor, sendo inferior ao necessário para a sua fratura. Na Figura 2.30 se ilustra a distribuição de tamanhos resultante nos dois casos. Por outro lado, a auto-

organização destes fragmentos após a fratura foi explorada em 2D por BEN-NUN e EINAV (2010) usando um leito de partículas confinado (material granulado) sob compressão. Um aspecto interessante deste trabalho foi a técnica usada para conservar a massa após a substituição. Isto foi feito realizando uma rápida expansão da massa das partículas filhas imediatamente após a criação (sem sobreposição) dentro do contorno espacial da partícula mãe retirada.

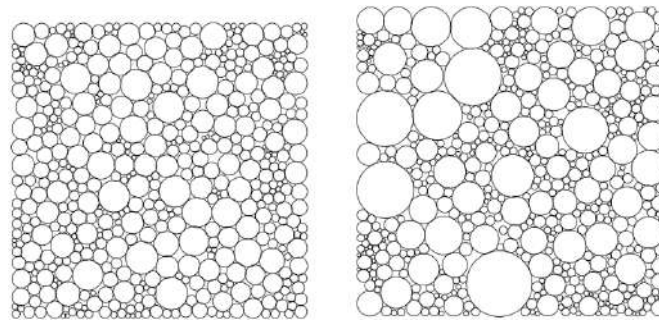


Figura 2.30. Distribuição de fragmentos resultantes após o carregamento: modo1, progênie conformada por dois fragmentos (esquerda). modo 2, progênie com 12 fragmentos (direita). Fonte: ÅSTRÖM e HERRMANN (1998).

Por outro lado, MCDOWELL e DE BONO (2013) fizeram uso da sobreposição de partículas para permitir a conservação da massa. Neste trabalho foi explorado em 3D o efeito da mudança da progênie, não se encontrando efeitos aparentes sobre a inclinação da curva de esforço normal de um leito confinado. Neste trabalho foi usado como critério de fratura das partículas, a distribuição estatística de Weibull.

A aplicação deste critério de fratura comparativamente com outras aproximações determinísticas para descrever esta propriedade foi explorada por CIL e BUSCARNERA (2016). Neste trabalho foram usados ensaios de compressão edométricos (BERRE e IVERSEN, 1972) de material granulado de partículas esféricas em 3D (Figura 2.31), mediante os quais conseguiu-se relacionar a resistência das partículas individuais (propriedades microscópicas) com as propriedades macroscópicas do arranjo de partículas. Por meio disto, encontrou-se que a energia de cominuição aplicada sobre o leito tem uma relação linear com a energia requerida para fraturar as partículas individuais.

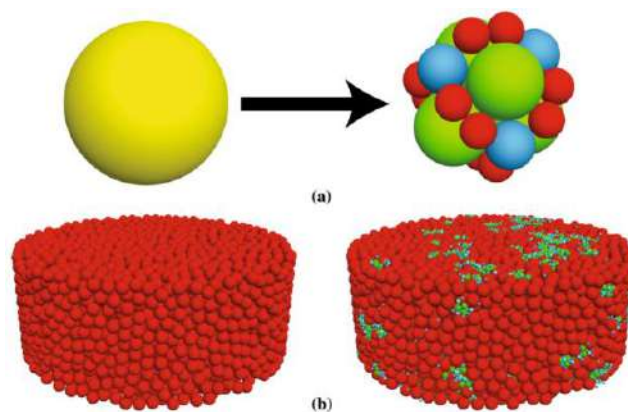


Figura 2.31. Ilustração de mecanismo de quebra no PRM: (a) quebra de partícula individual com o PRM. (b) quebra de leito de partículas esféricas confinadas. Fonte: CIL e BUSCARNERA (2016).

Vale ressaltar que nos trabalhos previamente discutidos não foi apresentada uma validação dos resultados com base em experimentos físicos. Entretanto, TSOUNGUI *et al.* (1999) fizeram parcialmente uma comparação dos resultados das simulações com resultados experimentais, a partir da qual conseguiu-se identificar dois regimes na compressão de um leito confinado de partículas: regime de quebra, no qual se apresenta a fratura dos grãos; e regime de saturação, em que a fratura para, devido ao efeito hidrostático sobre os grãos, onde se apresenta um empacotamento eficiente destes. Uma descoberta interessante no trabalho foi o incremento da eficiência da pressão edométrica na adição de deformações cisalhantes no processo de esforço do leito.

Um outro trabalho no qual foi realizada comparação das simulações com resultados experimentais foi desenvolvido por LOBO-GUERRERO e VALLEJO (2005). Neste trabalho foi usado o PRM em 2D para visualizar o processo de britagem de um leito de partículas de baixa resistência confinado e submetido a esforços cisalhantes. Os resultados mostraram aderência com os resultados experimentais para a evolução da porosidade do leito e a curva de esforço.

Existem outros trabalhos que estudaram a quebra de partículas usando o modelo de substituição de elementos em leitos confinados submetidos a compressão, as aplicações focam-se em materiais granulados (leito de partículas confinado) (DE BONO e MCDOWELL, 2016; HANLEY *et al.*, 2015; YANG e CHENG, 2015). No entanto, as aplicações em solos cimentados é mais escassa, já que para isto seria necessária também a modelagem da cimentação dos grãos formando um corpo único. DE BONO e

MCDOWELL, (2014b) trataram esse problema usando uma combinação do modelo de substituição de elementos – PRM com o modelo de ligação de elementos - BPM (POTYONDY e CUNDALL, 2004) na modelagem e simulação de areia de sílica cimentada com cimento Portland. Assim, a areia quebrável foi modelada usando o PRM e a cimentação dos grãos usando o BPM (Figura 2.32). A estratégia usada permitiu reproduzir dois tipos de fratura na amostra: a intergranular (fratura dos grãos) e a intragranular (fratura da matriz de cimento), tal como se observou nas imagens de microscopia eletrônica de varredura de uma amostra real. Por outro lado, na avaliação quantitativa encontrou-se um perfil de esforço-confinamento consistente com o resultado experimental. Um outro exemplo da combinação do PRM e o BPM é o trabalho de DE BONO e MCDOWELL (2014a). Contudo, neste caso o BPM foi usado para modelar uma membrana deformável usada em testes de cisalhamento triaxiais de alta pressão sobre material granulado.

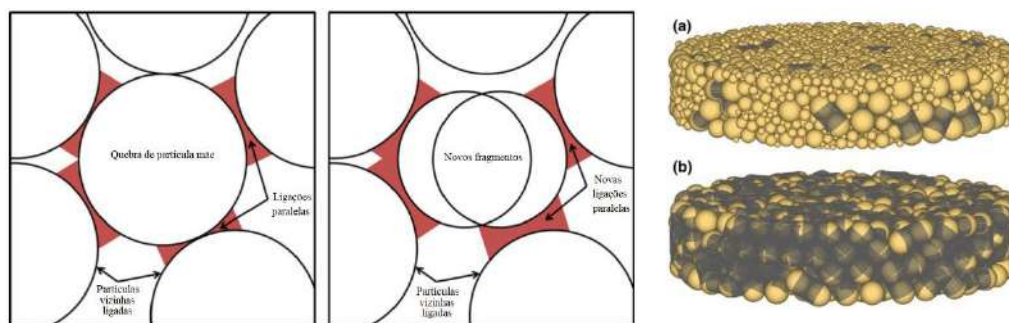


Figura 2.32. Simplificação 2D mostrando a criação de novas ligações depois da fratura de uma partícula (esquerda). Ilustração das ligações intactas depois de aplicar pressões verticais sobre duas diferentes amostras cimentadas: (a) e (b) (direita). Fonte: DE BONO e MCDOWELL (2014).

Muitas das referências previamente apresentadas fazem parte da área da construção civil e geotecnia, mas são muito relevantes na presente pesquisa, já que mostram as particularidades dos modelos e as suas capacidades em ensaios das mesmas características usados também como parte do estudo dos microprocessos de cominuição de minérios, tal como os ensaios de compressão de leitos confinados de partículas. Um trabalho no qual foram estudados os microprocessos de cominuição de minérios foi desenvolvido por BARRIOS *et al.* (2015) que, mediante o modelo de substituição de elementos, simulou em 3D ensaios de quebra de partículas confinadas usando um sistema

prensa pistão. Diferente das aproximações anteriores (geotecnia), em que era proposta uma distribuição de fragmentos (progênie) indiferente, no trabalho de BARRIOS *et al.* (2015) foi usado um conjunto de fragmentos esféricos definido por um modelo t_{10} descrevendo a quebra primária das partículas reais. Os resultados mostraram boa aderência em algumas das propriedades macroscópicas avaliadas, tal como o perfil de esforço-adensamento do leito, e o perfil de esforço das partículas quebradas. A distribuição de tamanhos do produto aderiu parcialmente aos resultados experimentais, mostrando o efeito de finura da distribuição com o incremento na força de carregamento. O modelo PRM proposto, usando elementos de tipo esférico em 3D, foi usado como base do trabalho de BARRIOS e TAVARES (2016) na simulação de uma prensa de rolos, “*High Pressure Grinding Rolls - HPGR*” (Figura 2.33) que reproduz a resposta dinâmica do rolo móvel de acordo às condições de carregamento.

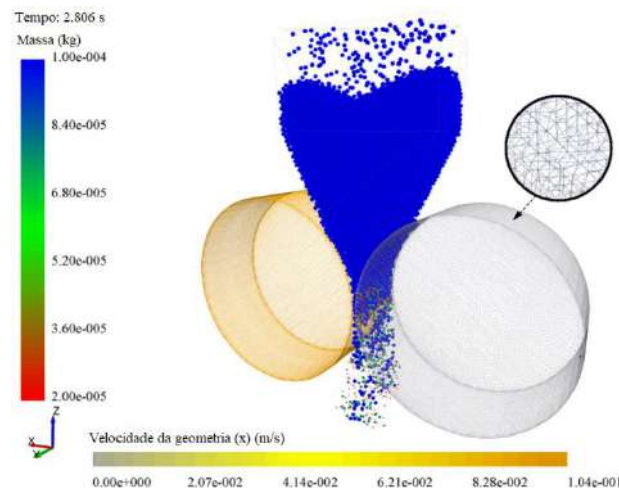


Figura 2.33. Simulação da quebra de partículas na prensa de rolos – HPGR. Fonte: BARRIOS e TAVARES (2016).

O uso do modelo de substituição de elementos para aplicações na simulação de equipamentos de cominuição tem sido amplamente estudado pelo pesquisador Paul W. Cleary. Duas publicações recentes apresentam um resumo das simulações de um amplo número de equipamentos (CLEARY e SINNOT, 2015; SINNOT e CLEARY, 2015). Uma destas (CLEARY e SINNOT, 2015) apresenta os britadores de tipo compressivo: britador de mandíbula, britador giratório, britador cônico, britador de rolos simples e duplos. A outra publicação (SINNOT e CLEARY, 2015) apresenta os britadores de impacto: britadores de martelo, britadores de impacto horizontal (VSI) e britadores de

impacto horizontal (HSI). As informações detalhadas de cada equipamento podem ser encontradas nas referências do trabalho correspondente.

Todas as referências apresentadas previamente usando o PRM mostraram o uso de modelos simples com base em partículas esféricas que na quebra são substituídas por fragmentos também esféricos. O uso deste tipo de geometrias ainda ofereça benefícios computacionais, embora com representações do fenômeno físico pouco realistas. Com base nisto DELANEY *et al.* (2010) propuseram um modelo de substituição de elementos usando geometrias superquádricas parametrizadas que reproduzem o formato de partículas mãe e, na quebra substituem por fragmentos com formato também baseados em geometrias superquádricas. Isto foi feito por meio de um algoritmo de empacotamento que gera partículas sementes no espaço de partícula mãe, as quais se expandem interagindo entre elas até o empacotamento efetivo no espaço da partícula mãe. O modelo de partículas com formato proposto foi usado na simulação de um britador cônico (Figura 2.34) por DELANEY *et al.* (2015). À diferença de outras publicações usando o PRM, neste trabalho a progênie não é constante em todos os casos, mas varia em cada evento de quebra de acordo a modelos empíricos de distribuição de tamanhos validados com dados experimentais. Dos resultados do trabalho preveem a vazão de descarga, a potência consumida, o desgaste do revestimento e a distribuição de tamanhos do produto. No entanto, não foi apresentada validação quantitativa com resultados experimentais.

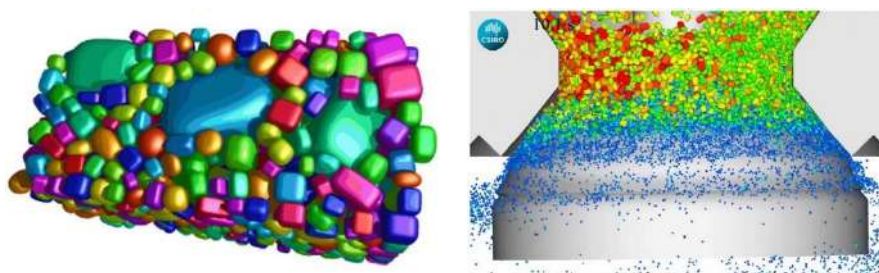


Figura 2.34. Simulação da quebra de partículas num britador cônico (direita). Exemplo de uma da distribuição de fragmentos (progênie) modelada para uso com o PRM (esquerda). Fonte: DELANEY *et al.* (2015).

Um outro trabalho em que foi também simulado um britador cônico foi desenvolvido por LI *et al.* (2014). Neste trabalho as partículas foram modeladas com formato esférico, a progênie usada representa uma distribuição experimental. No trabalho

foram avaliados dos tipos de progênie. A simulação conseguiu reproduzir o efeito da velocidade rotacional excêntrica e a abertura do britador “*Closed Size Setting – CSS*” sobre a distribuição de tamanhos do produto, sendo qualitativamente correspondente com resultados experimentais da literatura.

Uma característica muito marcada em todos os trabalhos apresentados previamente usando formatos esféricos foi o uso de uma distribuição de fragmentos da quebra (progênie) constante e fractal, ou seja, um conjunto constante de tamanhos de fragmentos em cada evento de quebra e que se repete de forma fractal. Com base na falta de realismo dessas aproximações, BRUCHMÜLLER *et al.* (2011) propuseram um modelo de PRM muito interessante usando partículas de tipo esférico, em que a distribuição de fragmentos da progênie é dependente da energia aplicada, do histórico de dano, do tamanho de partícula e das propriedades do material. No modelo proposto é introduzida a probabilidade de quebra baseada na aproximação de VOGEL e PEUKERT (2005), considerado mediante esta, o histórico de dano sobre a partícula. Por outro lado, a fragmentação tem sido modelada por meio de um simples parâmetro t_{10} , baseado na aproximação de SHI e KOJOVIC (2007), e um tamanho mínimo permitido. No trabalho foi simulado um moinho semi-autógeno. O modelo conseguiu prever a distribuição de tamanhos do produto, mostrando um bom ajuste com a distribuição de tamanhos experimental. Cabe ressaltar que o ajuste dos finos não foi representado, já que o custo computacional o limitaria.

Os modelos usados para descrever probabilidade e fragmentação no trabalho de BRUCHMÜLLER *et al.* (2011) foram também usados no modelo de quebra instantânea implementado no software Rocky, versão 3.11. Tal aproximação foi proposta por MORRISON *et al.* (2007) como uma alternativa para modelar a quebra incremental de partículas por impacto dentro do ambiente de simulação DEM.

Finalmente, cabe ressaltar que existem outros trabalhos que estudaram computacionalmente os microprocessos de cominuição fora do contexto DEM e os modelos de quebra previamente descritos. Um exemplo são os trabalhos de TANG *et al.* (2001) e KOU *et al.* (2001), em que foi aplicado o código de análise do processo de falha de rochas, “*Rock Failure Process Analysis – RFPA^{2D}*”, que é uma ferramenta numérica baseada no método dos elementos finitos, “*Finite Element Method – FEM*”, mas com

características distinguíveis que permitem a simulação de meios heterogêneos, tal como rochas e minérios, simulando a sua fratura (TANG, 1997). No trabalho de TANG *et al.* (2001) foi estudada a fratura de partículas individuais regulares e irregulares submetidas a compressão em diversas características de confinamento. Os resultados mostraram que o confinamento gera altas zonas de esforço nos pontos de contato, produzindo maior fragmentação com maior quantidade de finos nestas regiões, dado por um esforço compressivo ou cisalhante. As simulações conseguiram reproduzir o modo de falha de partículas reais, na qual se apresenta uma trinca principal que segue a trajetória perpendicular ao máximo esforço. Adicionalmente, foi encontrado que as partículas regulares (cilíndricas) apresentam maior resistência em comparação com as partículas irregulares. Por outro lado, no trabalho de KOU *et al.* (2001) foi estudada a quebra de leitos de partículas irregulares confinadas. Os resultados auxiliaram ao entendimento do fenômeno e foram fies ao fenômeno físico. Foi encontrado que no processo de carregamentos do leito se apresentam três regimes: *i*) deformação elástica das partículas, *ii*) fragmentação, e *iii*) endurecimento, dada esta última pela recuperação da rigidez devido à densificação do pacote de partículas. Por meio da simulação é possível observar o esforço gerado sobre toda a área da partícula e sobre todas as partículas do leito mediante *RFPA*^{2D} (Figura 2.35), graças a isto, conseguiu-se avaliar o efeito dos pontos de contato (parede/partícula, partícula/partícula) sendo nestes o início da falha das partículas. Adicionalmente, observou-se a atenuação do esforço compressivo desde o limite superior (ponto de aplicação de esforço) até o limite inferior da câmara, devido ao atrito entre os diferentes pontos de contato. Resultados similares, foram encontrados usando DEM por KHANAL *et al.* (2007) que fez uso do BPM.

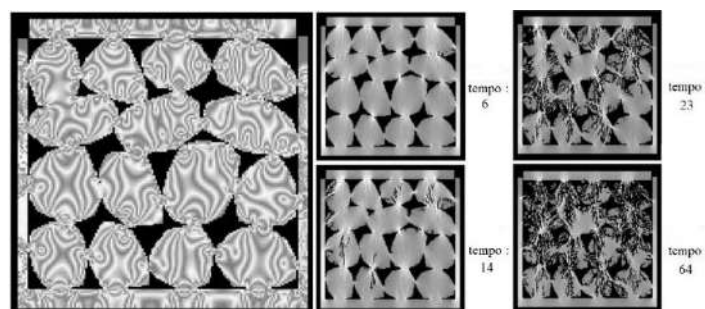


Figura 2.35. Padrão de distribuição de esforço sobre a área das partículas e geometria (esquerda) Processo de quebra de leito de partículas confinado (direita) (Fonte: KOU *et al.* (2001))

2.3.4 Caracterização de parâmetros DEM

Os parâmetros usualmente necessários para o desenvolvimento de uma simulação DEM envolvendo a quebra de partículas podem ser classificados em dois grupos:

- Parâmetros DEM das propriedades individuais e de contato dos materiais;
- Parâmetros DEM dos modelos de quebra.

2.3.4.1 Parâmetros DEM das propriedades individuais e de contato dos materiais

Dentro das propriedades individuais dos materiais podem se destacar o módulo de Young, o módulo de cisalhamento, o coeficiente de Poisson e a massa específica. Adicionalmente, o formato de partícula também pode ser incluindo neste grupo, já que caracteriza diferencialmente um processo com materiais particulados (LU *et al.*, 2015).

O módulo de Young Y , conhecido também como módulo de elasticidade é uma medida que permite caracterizar o comportamento elástico dos materiais. Este é definido como o esforço (força por unidade de área) sobre a deformação (Equação 2.54) em uma configuração de esforço uniaxial (Figura 2.36).

$$Y = \frac{F/A'}{\Delta l_x / l_{x,0}} \quad \text{Eq. 2.54}$$

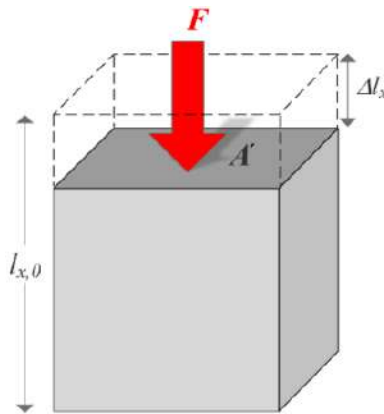


Figura 2.36. Ilustração de medida do módulo de Young num material. F é a força aplicada, A' é a área, Δl_x é o deslocamento, $l_{x,0}$ o comprimento inicial.

O módulo de cisalhamento G , também conhecido como módulo de rigidez, mede a resposta de materiais à deformação cisalhante, sendo esta definida como o esforço

aplicado sobre a deformação (Equação 2.55) em uma configuração de esforço cisalhante (Figura 2.37). Esta medida pode ser relacionada com o módulo de Young por meio da Equação 3.3:

$$Y = \frac{F/A'}{\Delta l_z/l_{x,0}} = \frac{F/A'}{\tan \theta_y} \quad \text{Eq. 2.55}$$

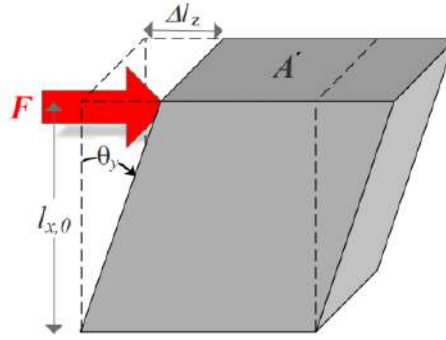


Figura 2.37. Ilustração de medida do módulo de cisalhamento num material. F é a força, A' é a área, Δl_y é o deslocamento, $l_{x,0}$ é o comprimento inicial da amostra, e θ_y é o ângulo de deslocamento.

O módulo de Poisson ν' é uma medida que expressa a relação adimensional entre a expansão lateral e a contração axial aplicada num material (Equação 2.56), numa configuração de esforço uniaxial (Figura 2.38):

$$\nu' = \frac{\varepsilon_{lateral}}{\varepsilon_{axial}} = \frac{\Delta l_y/l_{y,0}}{\Delta l_x/l_{x,0}} \quad \text{Eq. 2.56}$$

Na qual $\varepsilon_{lateral}$ e ε_{axial} , correspondem, respectivamente, à deformação lateral e axial.

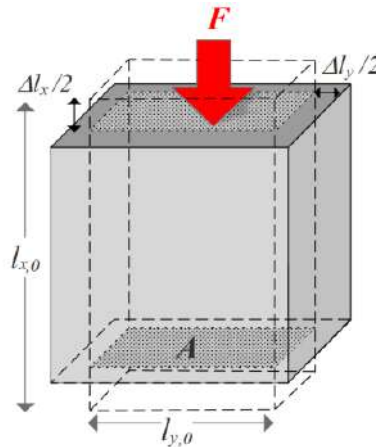


Figura 2.38. Ilustração de medida do modulo de Poisson. F é a força, A' é a area, Δl_y é o deslocamento lateral, $l_{y,0}$ é a largura inicial da amostra, e Δl_x é o deslocamento axial, e $l_{x,0}$ o comprimento inicial da amostra.

O formato do material, neste caso de partículas, pode ser caracterizado experimentalmente e parametrizado com base em duas relações: esfericidade e relação de aspecto, tal como mostrado em detalhe por BARRIOS *et al.* (2013) para pelotas de minério de ferro.

Dentro dos parâmetros de contato que caracterizam a interação entre diferentes materiais se encontram:

- Coeficiente de atrito, o qual é uma propriedade empírica que caracteriza o contato entre dois tipos de materiais com diferentes características superficiais (imperfeições macroscópicas). Este valor é usado para calcular o atrito, o qual expressa a força de resistência ao movimento escorregadio entre duas superfícies;
- Coeficiente de atrito de rolamento, o qual é uma propriedade que caracteriza a natureza (formato) de dois corpos em contato. Esta magnitude é usada para calcular o atrito de rolamento, o qual expressa a força de resistência ao movimento de rolamento entre duas superfícies, em ausência de movimento escorregadio;
- Coeficiente de restituição, indica a quantidade de energia cinética dissipada na colisão de uma partícula contra uma superfície, sendo relacionada por meio da velocidade que uma partícula apresenta antes e depois de um ensaio de queda autógena.

Dados experimentais destas magnitudes para diversos materiais têm sido recopilados em bases de dados dos softwares (DEM SOLUTIONS INC., 2016), na internet (MATBASE) e literatura (GERCEK, 2007b). A determinação destas propriedades mediante o apoio experimental para uso em DEM, tal como apresentado por BARRIOS *et al.* (2013), para algumas propriedades pode resultar em simulações que não reproduzem algumas propriedades no entorno virtual, assim a sua mudança e calibração dentro do ambiente de simulação DEM torna-se necessária.

A calibração faz referência a um processo cíclico de mudança de variáveis de entrada e observação de variáveis de saída. Assim no entorno DEM poderia ser importante de antemão entender o efeito da mudança de variáveis sobre a resposta da

simulação DEM. A análise do efeito das propriedades elásticas do material sobre a resposta foi mostrado em PAULICK *et al.* (2015) para algumas propriedades, e por LU *et al.* (2015) para o efeito do formato de partícula. Por outro lado, AI *et al.* (2011) avaliaram diversos modelos de resistência ao rolamento usados em códigos DEM.

COETZEE, (2017) recentemente apresentou uma revisão da calibração de propriedades no DEM. Outros exemplos de calibração podem ser encontrados em COETZEE e ELS (2009) e MARIGO e STITT (2015).

A estratégia usada para o calibração de parâmetros pode ser feita mediante o apoio de diversas ferramentas, tal como o planejamento de experimentos (MONTGOMERY, 2009), a análise de sensibilidade, entre outras.

2.3.4.2 Parâmetros DEM dos modelos de quebra

Considerando que os parâmetros dos modelos de quebra são diferentes para cada aproximação e na maioria dos casos não descrevem uma propriedade física real é necessária a sua calibração para permitir no material virtual a representação de um material real e um comportamento em concordância com o fenômeno físico.

YOON (2007) usou o planejamento de experimentos, com base num plano de “*Placket-Burman*” e o planejamento composto central “*Central Composite Design - CCD*” para a calibração dos parâmetros do modelo de ligação de elementos - BPM. As variáveis de saída macroscópicas avaliadas foram a resistência aos esforços compressivos, o módulo de Young e a razão de Poisson do aglomerado (partícula). Do mesmo modo HANLEY *et al.* (2011) uso o planejamento de experimentos com base no método de “*Taguchi*” para a calibração dos parâmetros do BPM na descrição da força normal de falha, deformação e rigidez de uma glomerado de esferas. Recentemente CHEHREGHANI *et al.* (2017) aplicou a metodologia de superfície de resposta para a calibração dos parâmetros do BPM de um corpo de prova de rocha. A sensibilidade dos parâmetros do modelo sobre a resistência da amostra e o módulo de elasticidade foram medidos por meio de ensaios de compressão uniaxial virtuais.

Considerando que o BPM (POTYONDY e CUNDALL, 2004) é um modelo complexo para ajustar para um dado comportamento macroscópico (CHO *et al.*, 2007) é

necessária a aplicação de uma metodologia de calibração. Por outro lado, a versatilidade de outras aproximações, tal como os modelos de quebra instantânea levam a processos de calibração menos complexos, os quais permitem a aplicação de metodologias mais simples, tal como uma análise de sensibilidade.

3 MATERIAIS E METODOLOGIA

A metodologia de trabalho está dividida em duas partes. A primeira etapa está focada na coleta das informações que servem como subsídios para o trabalho computacional. Nesta etapa inicial foram usadas informações de modelos analíticos, resultados de ensaios físicos para o material de estudo presentes na literatura e em diversas bases de dados, principalmente a do Laboratório de Tecnologia Mineral – LTM da COPPE/UFRJ. Adicionalmente foram realizados testes para complementar a caracterização, os quais são usados especificamente na calibração dos modelos. Na segunda parte são apresentados os softwares usados e as suas características gerais.

3.1 Materiais

O material modelo utilizado no presente estudo foi o minério de cobre da Mina Sossego da empresa VALE, localizada em Canaã de Carajás (PA). Detalhes mineralógicos e geológicos do depósito e minério podem ser encontrados em SHIMIZU (2012). Na Figura 3.1 e Figura 3.2 respectivamente, são apresentadas uma partícula individual com formato irregular e as diferentes configurações de leitos de partículas de monocamada usadas nos diferentes ensaios experimentais de caracterização do presente estudo.



Figura 3.1. Partícula do minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm.



(a) 1 Anel

(b) 2 Anéis

(c) 3 Anéis

(d) 4 Anéis

Figura 3.2. Arranjos de leitos de monocamada de partículas de minério de cobre de Sossego na faixa de 9,5x6,3 mm.

A seguir são descritos os ensaios de caracterização e os ensaios de quebra em leitos que foram realizados no presente estudo usando as partículas individuais e os leitos de partículas do minério de cobre. Entretanto é importante destacar que algumas das propriedades e parâmetros do minério de cobre foram obtidos da literatura.

3.2 Caracterização experimental

A caracterização experimental é a primeira etapa no trabalho de modelagem e simulação, já que é a fonte de referência da realidade virtual criada. Nesta etapa foi recompilada a informação necessária para a modelagem, calibração e validação dos experimentos virtuais que foram desenvolvidos usando partículas individuais e em leitos, mediante três modelos de quebra do ambiente DEM.

3.2.1 Experimentos de quebra de partículas por compressão

Cem partículas de minério de Cobre com formatos irregulares e tamanhos entre 9,5 e 6,3 mm foram pesadas, medidas e submetidas individualmente a testes de compressão uniaxial no equipamento EMIC DL 1000 (Figura 3.3), cujo pistão foi ajustado para descer com velocidade de 10 mm/s até o instante em que as partículas

quebravam. Concluídos os ensaios, todos os fragmentos foram coletados em conjunto e classificados por tamanhos usando o peneirador Gilson Performer III, Modelo SS3.



Figura 3.3. Equipamento de compressão uniaxial EMIC. DL 1000 (esquerda) e superfície da bigorna contendo os fragmentos de uma partícula (direita).

Por meio do ensaio de compressão foi possível determinar o perfil esforço-deformação correspondente a cada partícula. Para calcular o ponto de quebra de cada amostra, foram correlacionadas as observações no teste com os picos de queda drástica em força quantificados nos perfis esforço-deformação.

Por meio da distribuição de forças de quebra foi determinada a força média de quebra das partículas, a qual serviu para calcular a energia de quebra – E por meio da Equação 3.1:

$$E = \int_0^{\varepsilon_c} F d\varepsilon \quad \text{Eq. 3.1}$$

na qual F é a força, ε a deformação da partícula e ε_c a deformação na fratura.

As diferentes curvas de esforço-deformação foram avaliadas para selecionar as mais tipicamente encontradas e, assim, desenvolver o processo de calibração tentando replicar não só os pontos de ruptura, mas o perfil como um todo, o qual representa o comportamento médio do material sobre esforço. Por outro lado, a distribuição

granulométrica dos fragmentos obtida, que representa a quebra primária, foi usada para a modelagem das partículas virtuais.

3.2.2 Caracterização de parâmetros de quebra

Para a calibração e validação dos experimentos virtuais desenvolvidos na presente pesquisa foi usada a informação obtida nos ensaios de compressão uniaxial (seção 3.2.1) junto com detalhados resultados de quebra de partículas para o material de estudo já disponíveis na base de dados do LTM/COPPE. Especificamente, foram usados os resultados de ensaios de impactos duplos usando a célula de carga de impacto e os testes de queda de peso simples com esferas de aço. Isto forneceu as informações necessárias para a modelagem dos experimentos virtuais, assim como os valores de distribuições de energias de fratura, forças de fratura e as relações entre energia aplicada e fragmentação. Uma outra fonte de informação usada veio dos parâmetros que caracterizam a quebra do minério de cobre de Sossego nas faixas de tamanho estudadas, os quais permitem a construção das curvas para diversas funções, tal como o modelo de probabilidade de quebra (TAVARES, 1997) e a fragmentação, usando o modelo de t_{10} (TAVARES, 2004) junto à função beta incompleta (CARVALHO, 2009a). A Tabela 3.1 mostra as referências das quais foram obtidos as propriedades e parâmetros utilizados no presente estudo.

Tabela 3.1. Parâmetros dos modelos analíticos usados e suas fontes de referência.

Função - Propriedade	Parâmetros	Fonte de Referência
Modelo de Probabilidade - $P(E)$	$E_{m50} - \sigma_m$	BARRIOS (2011)
Energia média de fratura - E_{m50}	$E_{m,\infty} - d_o - \phi - k_p - k_{aço}$	
Desvio padrão do modelo $P(E)$ - σ_m	$\sigma_\infty - d' - \theta$	
Massa média - \bar{m}_p	$\rho - \beta$	
Modelo de t_{10}	$A - b$	
Função beta incompleta	α_n, β_n	
Modelo de captura	$a_c - b_c - c_c$	
Energia média de fratura experimental		BASE LTM
Força média de fratura experimental		

3.2.3 Quebra de leitos de partículas

Os experimentos de quebra por impacto de leitos de partículas desenvolvidos por BARRIOS (2010) serviram como base para o desenvolvimento do esquema de experimentos virtuais do presente trabalho. A Figura 3.4 ilustra a Célula de Carga de Impacto com barra de 63 mm de diâmetro para os experimentos de quebra de leitos por impacto com bola de 88 mm.

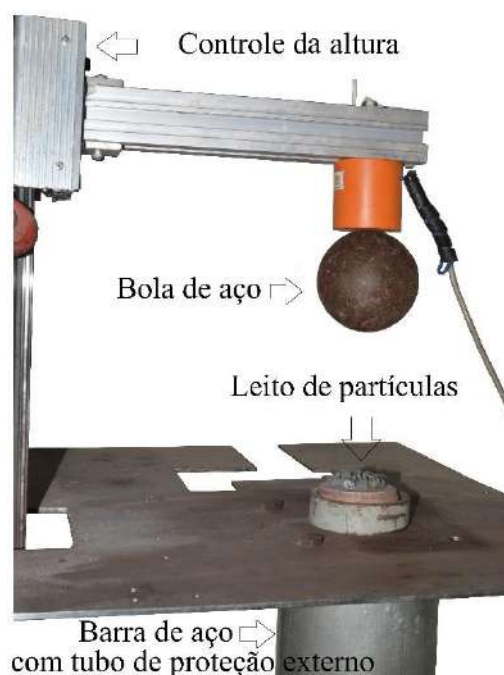


Figura 3.4. Célula de carga de impacto de 63 mm com acessórios para o ensaio de quebra de leitos por impacto com bola.

Na Tabela 3.2 é apresentada uma lista de experimentos virtuais planejados, a qual envolve ensaios virtuais de impacto sob diferentes configurações de leitos usando bolas de aço de diâmetros diferentes variando as energias de impacto.

Tabela 3.2. Experimentos virtuais de impacto planejados

Experimento	Diâmetro da esfera (mm)	Velocidade do impacto (m/s)	Energias de impacto (J)	Configuração arranjo
Impacto duplos com esfera	88 / 40	1,0 / 3,38	1,5	Partícula individual, leitos de partículas (1,2,3,4 Anéis, 1,2,3,4,5 camadas)
	88 / 40	1,44 / 4,78	3,0	
	88 / 40	2,53 / 8,30	9,0	

Após os impactos no leito, foi medido o grau de fragmentação, a massa quebrada e a captura de partículas. A fim de validar os resultados das simulações de leitos foram usadas funções quebra experimentais e medidas de massa quebrada e captura de partículas, tanto experimental quanto obtida mediante modelos analíticos.

3.2.4 Caracterização de parâmetros DEM

Previamente à realização de simulações usando o Método dos Elementos Discretos são necessárias informações sobre as propriedades individuais do material, do comportamento no contato com outros materiais, bem como da caracterização do formato das partículas que serão simuladas.

3.2.4.1 Caracterização de propriedades individuais

Os materiais considerados nos cenários de simulação são o minério de cobre e o aço, esse último correspondente à bigorna e ao impactor. Algumas das propriedades que descrevem o comportamento individual destes materiais que usualmente devem ser especificadas para uma simulação DEM são:

- i.* Módulo de Young - Y
- ii.* Módulo de Cisalhamento - G
- iii.* Razão de Poisson – ν'
- iv.* Massa específica - ρ

A determinação de algumas destas propriedades é feita experimentalmente usando ensaios de compressão sobre a amostra, tal como se apresenta no Capítulo 2 para as propriedades *i*, *ii* e *iii*, e indiretamente com base na massa e volume da amostra, para a propriedade *iv*.

Num ensaio de compressão lenta ou de impacto duplo na Célula de Carga de Impacto sobre a amostra, é obtido o seu perfil de esforço-deformação (TAVARES, 2007), sendo determinada a força de fratura - F_c , energia de fratura – E , e a sua rigidez k_m mediante as relações matemáticas apresentadas em TAVARES e KING (1998). Com base na rigidez da amostra e seu módulo de Poisson pode ser determinado o módulo de Young Y e o módulo de cisalhamento G , respectivamente, mediante as Equações 3.2 e 3.3:

$$Y = k \cdot (1 - \nu^2) \quad \text{Eq. 3.2}$$

$$G = \frac{Y}{(1 - \nu)} \quad \text{Eq. 3.3}$$

Para os materiais usados na presente pesquisa (minério de cobre e aço) foram usados dados da literatura. Especificamente o valor da razão de Poisson do minério foi extraído do trabalho de GERCEK (2007). De acordo com a geologia no depósito de Sossego (província de Carajás) apresentadas por MONTEIRO *et al.* (2008), o corpo de Sossego está hospedado em granito e rocha metavulcânica félsica. Assim o valor determinado para o módulo baseou-se principalmente em granito. Por outro lado, os valores para rigidez foram determinados a partir dos ensaios descritos na Seção 3.2.1.

Finalmente os valores para o Aço foram definidos a partir da informação apresentada por TAVARES e KING (1998) e HOWATSON *et al.* (1991) para este material.

3.2.4.2 Caracterização dos parâmetros de contato

Previamente às simulações é necessário definir as propriedades consideradas na interação destes materiais no ambiente de simulação DEM. As propriedades que devem ser descritas usualmente como parte do modelo de Hertz-Mindlin são:

- i. Coeficiente de restituição,
- ii. Coeficiente de atrito estático,
- iii. Coeficiente de resistência ao rolamento.

A determinação destas propriedades é feita experimentalmente usando diversos tipos de ensaios físicos e mecânicos, tal como apresentado por BARRIOS *et al.* (2013). O coeficiente de restituição de um material é determinado deixando em queda livre o material 'A' sobre uma dada superfície composta pelo material 'B'. No esquema experimental é usada uma câmara de alta velocidade que registra a posição da partícula nos diferentes frames por segundo para indiretamente determinar a velocidade antes (v_0) e depois (v_f) da colisão. A partir destes valores é calculada a razão v_0/v_f denominada coeficiente de restituição.

O coeficiente de atrito estático e dinâmico foi determinado com o auxílio de um tribómetro pino em disco “*pin-on-disk*”. O equipamento consiste de um instrumento de

medida da força normal F_{p-d}^n e tangencial F_{p-d}^t que é aplicada ao longo do tempo sobre um pino do material ‘A’ em contato sobre um disco giratório do material ‘B’. Mediante isto é determinada a relação F_{p-d}^t / F_{p-d}^n , denominada coeficiente de atrito. Para discernir entre o coeficiente de atrito estático e dinâmico basta observar o perfil atrito-tempo (abscissa/ordenada, respectivamente) gerado, o qual apresenta um incremento exponencial inicial após o qual se apresenta uma queda, a partir da qual mantém-se o valor relativamente constante no tempo. Este pico máximo inicial é denominado atrito estático, por outro lado, o valor médio de atrito da curva horizontal posterior (quase reta) é denominado atrito dinâmico.

Um dispositivo simples que registra o ângulo que uma placa plana apresenta em relação ao eixo horizontal é usado para determinar indiretamente o coeficiente de rolamento de uma partícula. Para isto, é disposta a partícula do material ‘A’ sobre a placa plana do material ‘B’ inicialmente em posição totalmente horizontal, em que a partícula fica em contato estacionário. Posteriormente, é inclinada lenta e progressivamente a placa (incrementando seu ângulo em relação ao eixo horizontal) até o instante de tempo que a ação da gravidade produz um torque sobre a partícula, tal que resulta no seu rolamento descendente sobre a placa. O ângulo entre a placa plana nesse instante de tempo é denominado ângulo de resistência ao rolamento β_r , que corresponde ao maior valor do ângulo em que a resistência ao rolamento contrabalança o torque da gravidade sobre a partícula. Assim, o coeficiente de resistência ao rolamento μ_r pode ser determinado por simplicidade mediante a Equação 3.4. Vale ressaltar que existem outras aproximações matemáticas para descrever este valor. Do mesmo modo, outros pesquisadores (GORYACHEVA, 2013) têm usado convencionalmente o valor da excentricidade como o coeficiente de resistência ao rolamento:

$$\mu_r = \tan \beta_r \quad \text{Eq. 3.4}$$

Na presente pesquisa foram usados resultados experimentais da medida destes coeficientes disponíveis na base de dados do Laboratório de Tecnologia Mineral – LTM, ainda não publicados por outros autores. Adicionalmente, mediante o experimento do ângulo de repouso experimental e em DEM (ZHOU *et al.*, 2002; ZHOU *et al.*, 1999) foi feita a calibração de alguns destes parâmetros (coeficiente de resistência ao rolamento e coeficiente de atrito).

3.2.4.3 Caracterização do formato de partícula

Uma partícula do minério de cobre de Sossego com formato representativo da população foi escolhida para ser reproduzida virtualmente. O modelo virtual em 3D foi construído usando o escâner DAVID 3D Lasercan (Figura 3.5). Este sistema gera uma geometria facetada de malha triangular (*Tessellate*), a qual pode ser exportada como um arquivo com extensão STL (*STereoLitographic Language*), que do mesmo modo pode ser editado em softwares CAD ou de malhas, nos quais pode ser refinada ou simplificada a malha, ou ajustado o tamanho escalando-o para as necessidades. A possibilidade de importar este tipo de arquivos em alguns softwares DEM torna possível a representação da partícula de maneira muito próxima à real. No entanto, é importante esclarecer que este recurso oferece só a superfície de revolução, cujas características internas precisariam ser determinadas com o auxílio de parâmetros, sendo particulares para cada modelo de quebra.

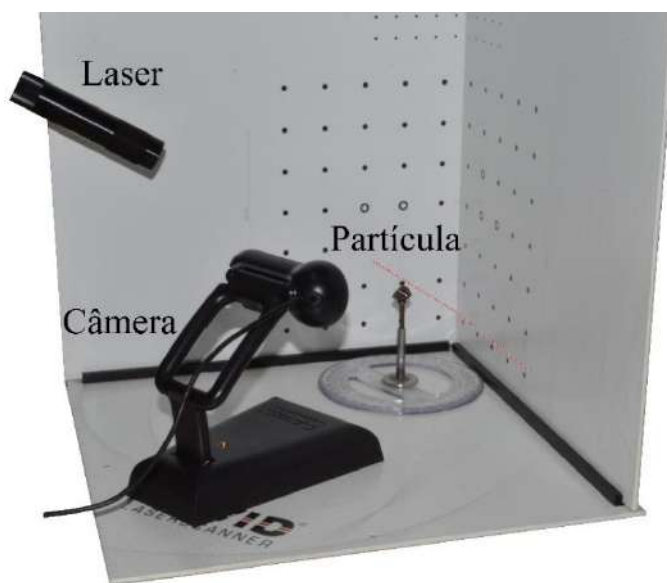


Figura 3.5. Sistema de scanner 3D.

3.2.5 Softwares de simulação baseados no Métodos dos Elementos Discretos

Para desenvolver os experimentos virtuais com os três modelos de quebra propostos foram usados dois softwares comerciais que usam o método: EDEM, desenvolvido pela DEM Solutions Ltd (DEM SOLUTIONS LTD., 1997) e Rocky desenvolvido por Rocky DEM Inc. (ROCKY DEM, 2014). Estes dois permitem a

modelagem e simulação em 3D de sistemas de partículas formadas por diversos materiais descritos mediante parâmetros físicos. Os códigos permitem a quantificação de diversas propriedades em qualquer intervalo de tempo de simulação. Adicionalmente, oferecem a possibilidade de gerar vídeos a partir de qualquer ponto espacial, nos quais são representados, por meio de cores diversas, propriedades físicas dos materiais e do sistema. Dentro das principais vantagens no uso desta ferramenta na presente área de estudo é a possibilidade de observar em detalhe, quantificar e caracterizar diversas propriedades na quebra de partículas em leitos, tal como a captura de partículas, a massa quebrada, a distribuição de energia no leito, entre outras. Evidentemente em experimentos reais não é possível a quantificação de algumas destas propriedades, menos ainda em cada intervalo de tempo.

O software EDEM permite a simulação de sistemas de partículas baseadas em esferas indeformáveis. Esta plataforma fornece dois modelos de quebra de partículas: O modelo de ligação de elementos e o modelo de substituição de elementos, sendo o último usando mediante uma interface de programação de aplicação, ou API. Na Tabela 3.3 são apresentados os parâmetros do EDEM para o tipo de material e as suas interações, os quais devem ser definidos de forma independente da consideração da quebra.

Tabela 3.3. Parâmetros gerais para simulação no EDEM e no Rocky

Tipo	EDEM	Rocky
	Densidade	Densidade
Parâmetros do Material	Módulo de cisalhamento	Módulo de Young
	Coeficiente de Poisson	Coeficiente de Poisson
Parâmetros de interação entre materiais	Coeficiente de rolamento	Resistência ao rolamento
	Coeficiente de atrito estático	Atrito estático e dinâmico
	Coeficiente de restituição	Coeficiente de restituição

Por outro lado, o software Rocky permite a simulação de sistemas particulados com base em elementos tanto esféricos quanto poliédricos. Esta plataforma fornece um modelo de quebra de partículas baseado em elementos poliédricos, o “*Fast Breakage Model – FBM*”.

Na Figura 3.6 e Figura 3.7, respectivamente, é apresentada a interface de simulação do EDEM e do Rocky. O cenário de simulação representado na figura é um

ensaio de impacto duplo usando uma esfera de aço, tal como na Célula de Carga de Impacto (CCI) em laboratório.

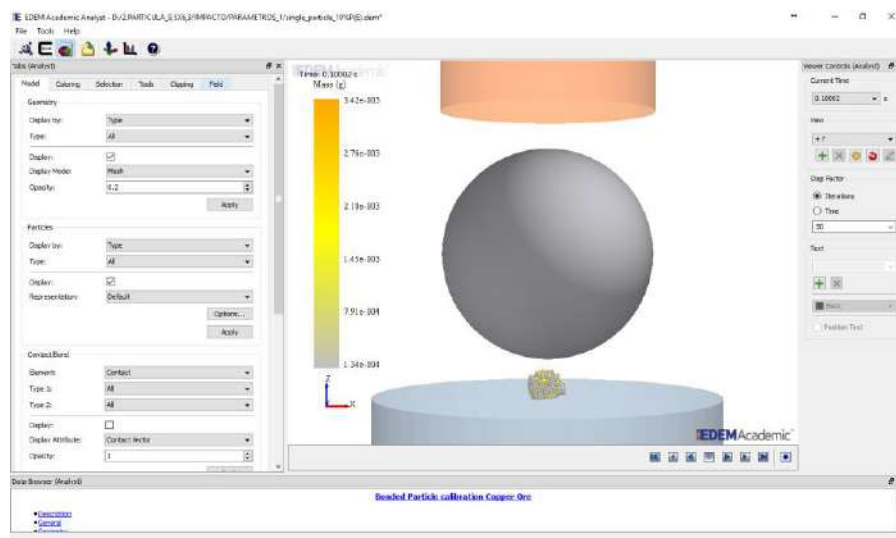


Figura 3.6. Interface de simulação do software EDEM com esquema de ensaio na CCI.

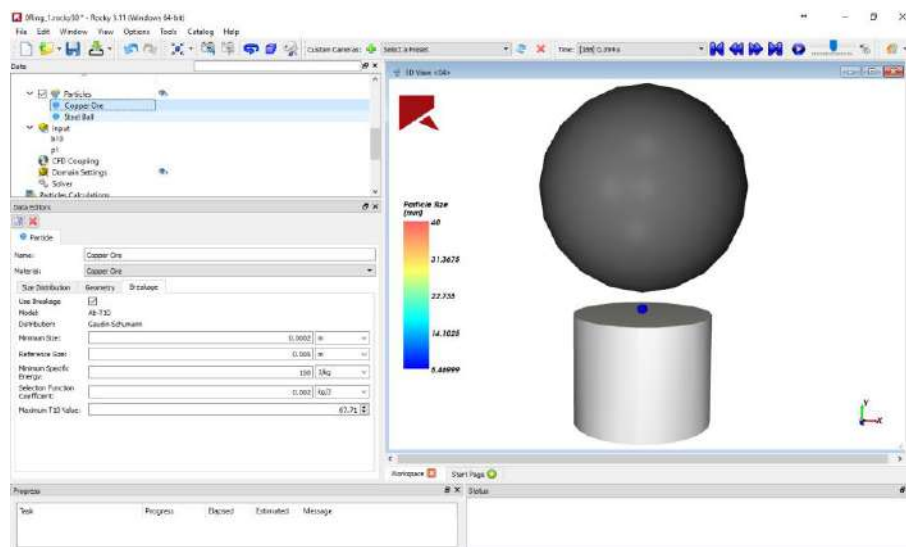


Figura 3.7. Interface de simulação do software Rocky com esquema de ensaio na CCI.

As versões dos modelos de quebra de partículas usadas na presente pesquisa foram: o modelo de ligação de elementos – *BPM*, tal como proposto por POTYONDY e CUNDALL (2004) e disponível no software EDEM (versão 2.7.2); o modelo de quebra instantânea - *FBM*, implementado no software Rocky (versão 3.11), o qual apresenta o uso de elementos tetraédricos, tal como no trabalho de LICHTER *et al.* (2009); e o modelo de substituição de elementos implementado para o seu uso como *API* no software EDEM,

que foi a base do trabalho de BARRIOS e TAVARES (2016), o qual mantém a filosofia do modelo original proposto por CLEARY (2001).

Os computadores usados na presente pesquisa apresentam as características necessárias para o desenvolvimento das simulações, tal como sugerido pelos fornecedores dos softwares, os quais descrevem nos sítios <http://www.edemsimulation.com/> e <http://rocky-dem.com/> os requisitos mínimos do sistema: espaço de memória, memória RAM, sistema operacional, entre outros. As características das duas estações de trabalho usadas no presente trabalho são apresentadas na Tabela 3.4.

Tabela 3.4. Características dos computadores usados nas simulações da presente pesquisa

ID do Computador	Sistema operacional	Processador	Disco duro	Memória RAM
1	Windows 10, 64 bits	Intel (R) Core TM i5 - 3470U CPU 3.20 GHz 3.20 GHz	932 GB	16 GB
2	Windows 7, 64 bits	Intel (R) Core TM i7 – 4790 CPU 3.6 GHz 3.60 GHz	932 GB	16 GB

Esta pesquisa foi centrada em dois tipos de experimentos: compressão uniaxial lenta usando prensa, e impacto duplo na Célula de Carga de Impacto. Na Tabela 3.5 é apresentado o tipo de experimento usado para calibração e validação de cada modelo. Mais detalhes do procedimento são apresentados no capítulo de modelagem.

Tabela 3.5. Tipo de experimento usado com os modelos para cada etapa do trabalho

Modelo	Calibração	Exploração e Validação
BPM	Compressão uniaxial	Impacto duplo com esfera
FBM	Impacto duplo com esfera	Impacto duplo com esfera
PRM	Compressão uniaxial	Impacto duplo com esfera

3.2.5.1 Pós-processamento de informações com os modelos de quebra do ambiente DEM

Uma das limitações apresentadas do modelo de ligações de elementos do EDEM é a determinação de distribuição de tamanho após um ensaio de quebra de partículas, sendo o número de ligações quebradas a única quantidade diretamente extraível para quantificá-la. Considerando isto, para determinar uma distribuição de tamanhos aproximada foi usada a análise de imagem, de forma análoga ao trabalho de QUIST e EVERTSSON (2016). Este é um procedimento no qual se obtém, a partir de direções distintas, imagens em duas dimensões dos fragmentos. No procedimento, as imagens são transformadas em binárias (branco e preto), sendo que as partículas correspondem à cor preta e o fundo ao branco. Posteriormente é analisada a imagem, determinando o tamanho representativo de cada área preta e entregando a distribuição de áreas, as quais são equivalentes a uma distribuição de tamanhos.

Por outro lado, no modelo de elementos tetraédricos e de substituição de elementos, os softwares permitem a determinação quase direta da distribuição de tamanhos após a quebra, assim como a captura de partículas.

Particularmente nos testes de impacto com bola, o tempo da simulação usado para extrair as informações de fragmentação e captura foi o instante exato de tempo que a bola começa a sua restituição após impactar o arranjo de partículas.

4 MODELAGEM

Na primeira parte do presente capítulo é descrita a modelagem das partículas individuais e os critérios para calibração dos parâmetros dos modelos de quebra de partículas que são usados dentro do ambiente de simulação do método dos elementos discretos.

Na segunda parte, é descrita a modelagem das configurações dos leitos de partículas e os detalhes das simulações da quebra de leitos por impacto, realizadas nos softwares de DEM.

4.1 Modelagem da quebra de partículas individuais no ambiente de simulação DEM

A presente seção está estruturada com base nos seguintes modelos de quebra de partículas, os quais se encontram disponíveis nos softwares de simulação DEM:

- Modelo de ligação de elementos - BPM, do software EDEM;
- Modelo de substituição de elementos - PRM, do software EDEM;
- Modelo de elementos tetraédricos – FBM do software Rocky.

O propósito da presente seção é apresentar como são criadas as partículas individuais que serão simuladas e as estratégias para calibração dos parâmetros de cada modelo.

4.1.1 Modelo de ligação de elementos - BPM

O modelo de ligação de elementos (*BPM*) do software EDEM, utiliza o modelo de contato de Hertz-Mindlin sem escorregamento. Os parâmetros do modelo são apresentados na Tabela 4.1.

Diferentes combinações destes parâmetros permitem definir diversos comportamentos mecânicos no aglomerado modelado que dificultam o processo de calibração. Considerando isto, a calibração do material do presente estudo (minério) foi feita usando um processo que incluía inicialmente o exame das expressões que definem

o modelo, posteriormente a revisão na literatura de parâmetros que definiram esse comportamento, e finalmente, o desenvolvimento de planos experimentais e uma análise de sensibilidade.

Tabela 4.1. Parâmetro dos modelos de quebra BPM do EDEM

Modelo de quebra	Parâmetro
Modelo de ligação de elementos	Rigidez normal – kbn
	Rigidez Cisalhante – kbs
	Esforço crítico normal – σ_{cr}
	Esforço crítico cisalhante – τ_{cr}
	Raio do disco da ligação – bdr

Considerando que no modelo de BPM as partículas individuais são representadas na forma de “metapartículas”, que são basicamente aglomerados de esferas mantidas juntas por meio de ligações que apresentam propriedades individuais, foi necessário definir os seguintes passos para a modelagem das metapartículas:

- Distribuição de tamanho das esferas da metapartícula;
- Criação de aglomerados de esferas;
- Calibração dos parâmetros do modelo BPM.

Na Figura 4.1, são ilustrados os diferentes estágios na criação de uma metapartícula no simulador EDEM.

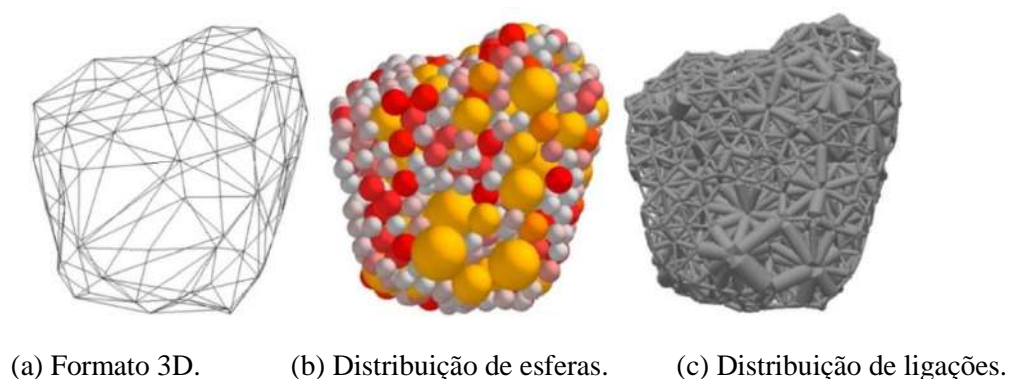


Figura 4.1. Processo de modelagem de uma metapartícula no EDEM: (a) importação do formato 3D da partícula real em formato STL, (b) preenchimento da geometria 3D com uma dada distribuição de esferas, (c) criação das ligações entre as esferas com parâmetros calibrados

4.1.1.1 Distribuição de tamanho de esferas da metapartícula

Os parâmetros DEM do material, assim como o formato da partícula foram definidos, tal como descrito no Capítulo 3. Os parâmetros individuais e de contato das esferas foram definidos no módulo de criação (*Creator*) do simulador EDEM. O modelo 3D da partícula em formato STL (Figura 4.1) foi escalado para os tamanhos de partícula de interesse (9,5 x 6,3 mm e 6,3 x 4,75 mm) usando o software de malhas MeshLab® e posteriormente foi importado no EDEM a partir do módulo de importação de geometrias. O ajuste do tamanho foi feito para assegurar a correspondência do tamanho estudado com base nas transformações sofridas durante o escaneamento da partícula.

Com base no modelo 3D da partícula real, foram definidas as características internas da metapartícula, inicialmente pela distribuição de esferas, a qual determina a distribuição de ligações (Figura 4.1) e, posteriormente, pelos parâmetros de resistência fixados para estas. O tamanho de cada ligação é proporcional ao tamanho de cada par de esferas em pseudo-contato efetivo, que é definido como a distância entre elementos, necessário para que as ligações do BPM sejam criadas. Assim, uma distribuição variada de esferas oferece características heterogêneas no material virtual, cujo comportamento mecânico final será determinado pelos valores das componentes já descritas.

Diversos fatores devem ser considerados na modelagem de uma partícula mineral usando o modelo de ligações de elementos. Inicialmente, numa modelagem realista deveria ser reproduzida a heterogeneidade presente na microestrutura dos minérios, uma vez que esta influencia as propriedades mecânicas resultantes. Uma alternativa para tratar disto seria inserir variabilidade mediante a distribuição de esferas e assim no tamanho das ligações futuras entre as esferas. Evidentemente na modelagem a base de monotamanhos se apresentariam características homogêneas no aglomerado, devido às limitações da versão do modelo BPM usado na presente pesquisa (*Hertz–Mindlin with bonding / EDEM*).

Uma outra vantagem que se apresenta no uso da variabilidade nas distribuições de tamanhos é o ganho na densidade de empacotamento, o qual é inversamente proporcional à perda de massa, ou seja, quanto maior o empacotamento menos espaços vazios se encontram na geometria 3D da partícula, aproximando mais a massa modelada com a massa real (Figura 4.2). Entretanto, é imprescindível definir adequadamente o tamanho

das esferas limites, tanto maior quanto menor, já que numa simulação de quebra de partículas real se esperaria apresentar fragmentos inquebráveis, os quais, computacionalmente seriam os análogos das esferas de maior tamanho. Uma das alternativas que poderia ser aplicada para resolver os problemas das partículas inquebráveis de maior tamanho é usar em combinação o modelo de ligação de elementos - BPM e o modelo de substituição de elementos – PRM, de forma ao que foi feito por MCDOWELL (2014) para a modelagem e simulação de grãos de areia cimentada. Neste caso as partículas de maior tamanho, como as apresentadas na Figura 4.2 (a) e (b) seriam objeto de substituição no momento de se atingir o dado critério. Vale ressaltar que as características mecânicas destas diferem do resto de material, tal como se apresenta nos diferentes grãos de uma partícula real.

Por outro lado, a limitação associada ao uso de esferas de diâmetros muito pequenos seria computacional, uma vez que um tamanho mínimo muito pequeno implicaria no uso de um maior número de elementos para preencher um dado espaço, tal como a geometria 3D da partícula (Figura 4.2 (c)).

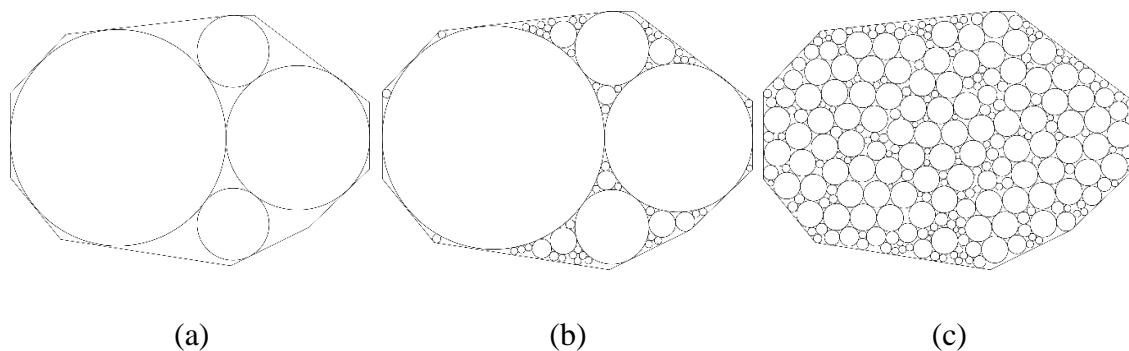


Figura 4.2. Distribuições de esferas no empacotamento de metapartículas.

O esforço computacional numa simulação usando DEM é proporcional ao número de elementos. Incluir a quebra de partículas aumentaria notavelmente este custo, já que implica o uso de rotinas de cálculo adicionais e um número notavelmente maior de elementos que uma situação análoga sem o uso da quebra, ou seja, cada elemento que simula uma partícula “passa a ser” um aglomerado de elementos (metapartícula). Somado a isto, um esforço computacional adicional que deve ser estimado no uso do modelo de quebra no BPM é o número de ligações criadas por partícula, o qual pode ser superior a

três ligações por cada elemento. Este número irá depender da quantidade de pontos de pseudo-contato efetivo entre cada par de esferas, ou seja, pontos aonde serão criadas ligações.

Com base no esforço computacional descrito previamente e visando o desenvolvimento de simulações robustas nas quais seja considerado um amplo número de metapartículas, deve ser definido um valor conservador de elementos por aglomerado, o qual apresente um valor médio de tamanhos de esferas que represente a redução da metapartícula razoavelmente bem. Especificamente, as metapartículas modeladas na presente pesquisa apresentam em média 500 elementos, os quais estão distribuídos em tamanhos de entre 4 e 15 vezes menores que o tamanho da partícula mãe. No caso da metapartícula de 5,47 mm isso representaria que a máxima redução de tamanho que poderia ser atingida estaria limitada a uma distribuição de fragmentos esféricos com diâmetros compreendidos entre 0,4 e 1,4 mm, aproximadamente.

As metapartículas construídas na presente pesquisa foram construídas com base em distribuições normais. Diversos autores (BROUWERS, 2006; GROOT e STOYANOV, 2011) ressaltam os benefícios no uso de distribuições de tipo bimodal para assegurar o empacotamento. No entanto, esta consideração afetaria outros critérios, tal como o número de elementos por metapartícula e o tamanho da esfera limite. Evidentemente, antes da modelagem é necessário avaliar rigorosamente todos os fatores equilibrando o nível de importância de cada um. Na Figura 4.2 é possível observar os efeitos do empacotamento no uso de diversas distribuições. Claramente, as esferas grandes favorecem a perda de massa e um número reduzido de pontos de contato, e o mesmo acontece no uso de monotamanhos, sendo ainda mais crítica a perda de massa neste caso. Por outro lado, as distribuições de tamanhos de esferas oferecem grande número de pontos de contato e beneficiam tanto na modelagem, quanto na estabilidade do aglomerado, contudo incrementando o número de elementos por metapartícula. A partir dessa pesquisa foi visto que a estabilidade de um aglomerado é fortemente influenciada pela combinação das componentes a seguir:

- Parâmetros físicos das esferas;
- Raio de contato das esferas;
- Distribuição das esferas;
- Parâmetros das ligações;
- Passo de tempo na simulação.

As metapartículas usadas na presente pesquisa foram modeladas para oferecer uma quantidade limitada de elementos, ainda que oferecendo uma boa resolução da fragmentação. Estas foram construídas com base no formato 3D do cobre de Sossego no tamanho de 5,47 mm e foram modeladas fazendo uso das considerações apresentadas, assegurando estabilidade e um bom empacotamento da distribuição de esferas no espaço da geometria da partícula.

4.1.1.2 Criação de aglomerados de esferas

Esta seção diz respeito à forma na qual são arranjadas as esferas dentro da superfície 3D da partícula. No software EDEM, isto pode ser feito de duas formas:

- a) Preenchimento de uma geometria STL importada usando fábricas predefinidas no software EDEM.
- b) Usando uma fábrica customizada, predefinida externamente e criada na simulação por meio de uma API.

A Figura 4.3 ilustra os passos envolvidos na criação de um aglomerado de esferas usando o modelo 3D de uma partícula real em formato STL. Primeiro é importada a geometria da partícula em STL dentro de um cilindro, o qual é preenchido com uma distribuição de tamanhos (Figura 4.3 (a)). Posteriormente é retirado o cilindro para deixar só as esferas que ficaram dentro da geometria STL da partícula (Figura 4.3 (b)). Na Figura 4.3 (c) é apresentada a metapartícula resultante.

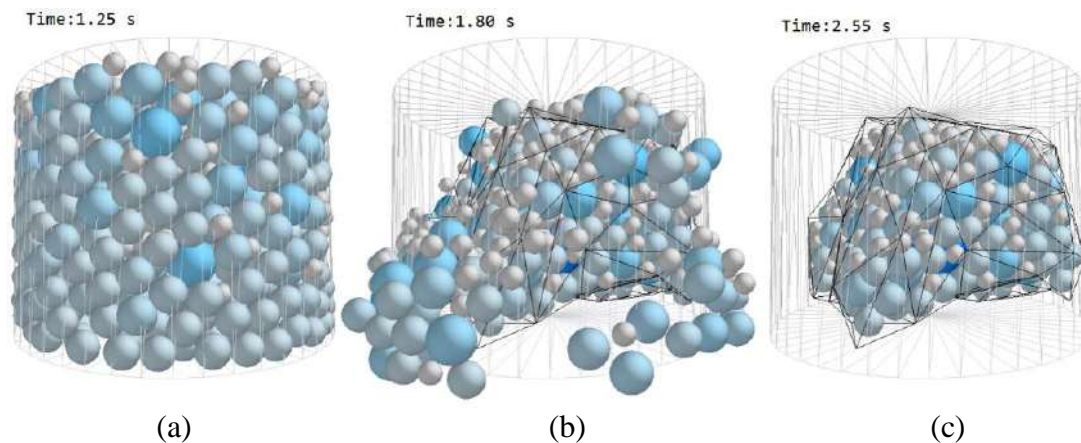


Figura 4.3. Processo de criação do aglomerado de partículas que conforma a metapartícula.

O fluxograma apresentado na Figura 4.4 mostra a metodologia para criação de metapartículas. No processo de criação usando API, a malha 3D da partícula não é usada para contornar fisicamente as esferas, mas como uma referência inserida quando preenchido o cilindro, a qual serve só como um domínio das coordenadas e diâmetros das partículas que modelam a geometria 3D da partícula. Esta opção foi a mais usada na presente pesquisa, pois permitiu a obtenção de aglomerados com maior empacotamento.

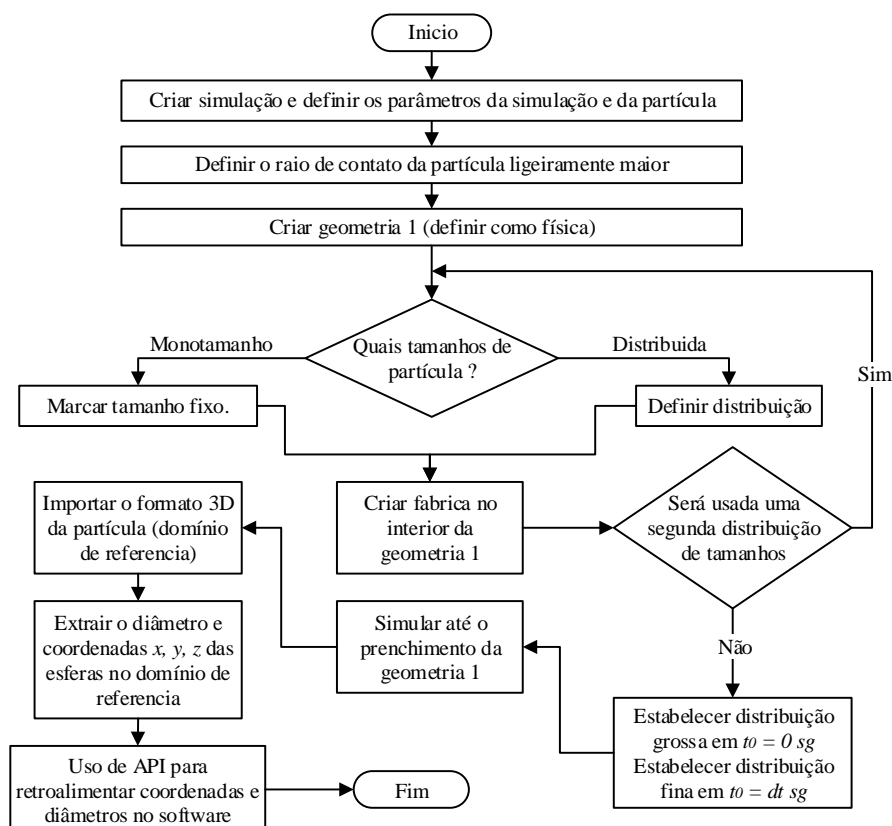


Figura 4.4. Metodologias de construção de metapartículas usando API no EDEM

O algoritmo de substituição de esferas é uma rotina criada como uma API, para ordenar ao software a criação de partículas num dado momento. Na rotina são definidos os parâmetros que indicam o tempo de criação das partículas, as coordenadas x, y, z, o diâmetro, entre outras características.

Para usar esta API, primeiro é definida no software uma partícula de raio qualquer (elemento inicial, Figura 4.5 (a)). Esta serve só como uma referência espacial e deve ser criada no software no tempo $t = 0$ s. Posteriormente é definida uma outra partícula, a qual serve como referência para as esferas a serem criadas posteriormente, de modo que seu tamanho vai depender da distribuição de esferas da metapartícula modelada previamente. É importante destacar que esta última partícula não é criada diretamente a partir da interface do software, devendo apenas ser definido o tempo para criar ligações entre partículas do mesmo tipo (tempo $t = dt$ s). Neste instante de tempo estipulado para a substituição ($t = dt$ s), a rotina ordena ao software criar uma distribuição de esferas (elementos finais, Figura 4.5 (b)) em relação ao tamanho da partícula de referência definida no software. Considerando que o tempo definido para criar ligações é igual ao tempo da substituição, então entre cada par de esferas são criadas ligações que constituem um aglomerado ou meta-elemento. Como já foi descrito, a escolha de parâmetros das ligações e passo de tempo inadequados na simulação implicaria na geração de uma metapartícula instável, que se revela visualmente como umas partículas que pode ser vítima de desmoronamento parcial ou até de fragmentação “explosiva”.

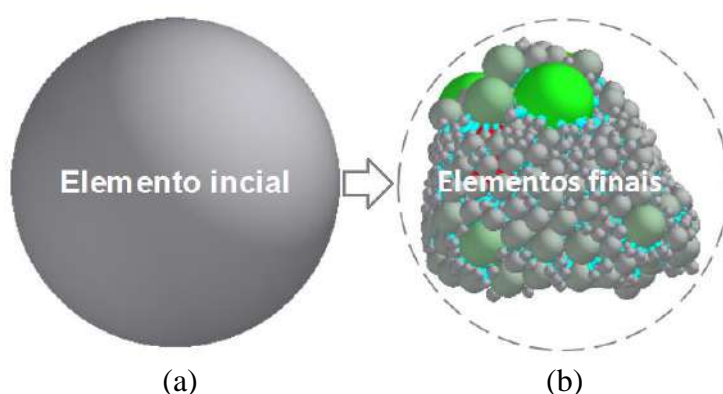


Figura 4.5. Processo de substituição de elementos para partícula individual usando API.

4.1.1.2.1 Calibração dos parâmetros do modelo BPM

Conforme mencionado na metodologia, a calibração do modelo BPM se baseia nos resultados experimentais dos ensaios de quebra de partículas individuais por compressão e nos dados históricos de quebra de partículas individuais na Célula de Carga de Impacto do LTM/COPPE.

Para a calibração dos parâmetros do BPM foram realizadas simulações de compressão uniaxial das metapartículas, das quais foram extraídas diferentes propriedades de referência:

1. Tipo de ruptura da partícula;
2. Força de quebra das partículas;
3. Perfil esforço-deformação;
4. Energia de quebra das partículas;
5. Porcentagem de ligações quebradas na ruptura do aglomerado.

O perfil esforço-deformação pode ser definido como o item que engloba, embora algumas delas indiretamente, as demais propriedades, ou seja, um perfil representativo de uma população deveria apresentar aproximadamente a força e a energia média de quebra do material. Para o caso dos minérios a quebra ao longo de um plano preferencial (clivagem), o qual representaria a subdivisão do corpo em duas partes principais e alguns finos (Figura 2.9), considerando-se o dano parcial residual do material, seria representado no material virtual mediante as ligações quebradas.

Atingir cada critério de calibração da lista anterior numa partícula virtual é um trabalho complexo. De fato, o rigor aplicado para obter o perfil esforço-deformação é alto. No entanto, existem outras características mecânicas que foram desconsideradas devido à complexidade que implicam, os recursos disponíveis com o modelo de quebra usado e o potencial esforço computacional demandado.

Ainda que não estivesse incluída na lista anterior, a estabilidade da metapartícula foi o critério inicialmente avaliado em todos os casos, já que mesmo obtendo um aglomerado corporificado, este não é totalmente estável e pode perder muitos elementos na criação ou ao longo do tempo e sem esforços aparentes.

No presente trabalho foram consideradas duas formas para realizar a calibração: usando planos experimentais ou por meio de análises de sensibilidade. Cabe ressaltar que estes procedimentos devem ser usados de acordo a situação estudada e nem sempre são adequados para todas os casos. Por outro lado, independente do caráter da situação ou da metodologia usada, todo contexto exige no início a demarcação das condições iniciais. Particularmente aqui, os valores iniciais dos parâmetros se basearam em referências bibliográficas (CHO *et al.*, 2007; HANLEY *et al.*, 2011).

O processo de calibração visando a validação do modelo foi feito com base nas partículas de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm, cuja energia média de fratura é 0,15 J.

A metodologia usada para a calibração foi a realização de simulações seguindo um plano fatorial com posterior otimização da resposta por meio de uma análise de sensibilidade. O plano estabelecido apresenta as cinco variáveis correspondentes aos parâmetros do modelo BPM, e como variáveis de saída: a força de quebra, a energia de quebra, a porcentagem de ligações quebradas na ruptura, o perfil esforço-deformação e a estabilidade. Com base nas informações de referência da literatura e os resultados obtidos com os modelos já testados, foram estabelecidos os valores dos níveis estudados. A variação dos parâmetros foi feita com base nas considerações descritas em POTYONDY e CUNDALL (2004) e YOON (2007), os quais sugerem controlar as variáveis usando uma razão da rigidez normal sobre a rigidez cisalhante. Considerando isto, o plano fatorial 2^5 (MONTGOMERY, 2009) foi estabelecido para apresentar 16 corridas de simulação. Detalhes do plano usado são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2. Valores dos níveis das variáveis de entrada do plano para calibração

Variáveis de entrada	Unidades	Níveis	
		-1	1
Rigidez normal <i>kbn</i>	N/m ³	1,0E+11	9,0E+11
<i>kbn/kbs</i>	-	1,0	4,0
Esforço critico cisalhante <i>τcr</i>	Pa	1,0E+07	5,0E+08
<i>τcr/σcr</i>	-	1	5
Raio do disco da ligação <i>bdr</i>	Mm	1,00	1,50

Posterior ao desenvolvimento do plano, foram escolhidas as combinações dos parâmetros que ofereciam respostas próximas ao esperado, considerando todas as variáveis de saída já descritas. A partir disto, procedeu-se à otimização da resposta por meio de uma análise de sensibilidade, na qual, da mesma forma que no plano fatorial, foram consideradas todas as variáveis de saída.

4.1.2 Modelo de elementos tetraédricos - FBM

O modelo de elementos tetraédricos, “*Fast Breakage Model – FBM*”, do software Rocky (versão 3.11), utiliza o modelo de histerese linear. Este é o único dos três modelos de quebra estudados na presente pesquisa que se baseia diretamente em modelos analíticos usados na cominuição. Sendo assim os parâmetros que descrevem a quebra e a fragmentação estão definidos por magnitudes reconhecidas na área. Especificamente o *FBM* do Rocky é composto por dois modelos, sendo um que descreve a probabilidade de quebra e outro que descreve a intensidade da fragmentação, os quais têm quatro parâmetros (tamanho de referência, energia mínima de referência, coeficiente da função seleção e valor máximo de t_{10}). Além desses parâmetros, tem-se ainda o tamanho mínimo de partícula que é permitido na simulação. De forma muito distinta àquela descrita pelo modelo de quebra *BPM*, a combinação dos parâmetros do modelo *FBM* incide só nas funções descritas, ou seja, o modelo oferece incrementos ou decrementos na probabilidade de quebra e no grau de fragmentação, e não nas propriedades mecânicas. Modelos analíticos e dados experimentais para o minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 foram usados como referência para a calibração.

Para a modelagem da quebra de partículas individuais usando o FBM foram definidos os seguintes passos:

- Modelagem do formato das partículas simuladas;
- Calibração dos parâmetros do modelo de FBM.

Na seção 4.2 são apresentados os parâmetros usados para construir o modelo principal de partícula no software, o qual foi replicado nas simulações de impacto em leitos de partículas. Na segunda parte é apresentado o processo de calibração dos parâmetros do modelo de quebra da partícula individual.

4.1.2.1 Modelagem do formato das partículas

A modelagem do formato de uma partícula individual no software Rocky pode ser considerada como um processo simples, o qual envolve só a definição dos parâmetros que caracterizam o formato e resolução da geometria que representa a partícula. As geometrias predefinidas no software são uma família de superquádricas, definidas por meio de seis parâmetros. A Tabela 4.3 lista os parâmetros usados para modelar a partícula individual do presente estudo, enquanto a Figura 4.6 ilustra uma partícula modelada.

Tabela 4.3. Características da partícula modelada desde o software Rocky

Parâmetro	Valor
Tipo de formato	Facetado
Relação de aspecto vertical	0,8
Relação de aspecto horizontal	1
Número de quinas	25
Grau de superquádrica	3

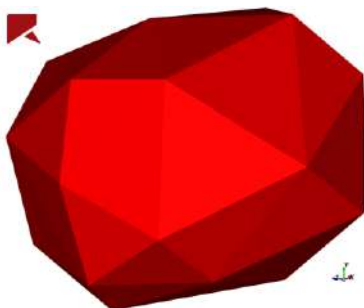


Figura 4.6. Partícula de minério de cobre modelada no Rocky

As características da geometria foram escolhidas visando uma aproximação com o formato da partícula real. No presente estudo, foi avaliado o uso do módulo de geometrias customizadas do Rocky, o qual permite a importação do formato da partícula real, tal como feito no software EDEM, e aplicado para a modelagem da metapartícula no BPM. Cabe ressaltar que embora também seja possível a quebra deste tipo de formatos, considerou-se trabalhar com uma geometria parametrizada e predefinida. A determinação fundamentou-se na falta de informação que exponha como foi implementada a comunicação entre o algoritmo de Voronoi e o modelo de fragmentação.

O tamanho da partícula modelada foi de 5,47 mm, sendo este o tamanho representativo na faixa de 6,3 x 4,75 mm. Cabe ressaltar que não foram estudados outros tamanhos de partícula. No entanto, com os resultados obtidos para esta faixa e análise do modelo é possível obter uma aproximação para outros tamanhos.

Uma das características na modelagem dos cenários de experimentação no Rocky é a necessidade de importar no software qualquer geometria, mesmo as básicas. Para fazer isso, é usado externamente um software CAD, tal como SketchUp (usado no presente trabalho), no qual é gerado um arquivo *stl* que é importado no Rocky.

Especificamente para os propósitos do uso deste modelo, foi construída uma geometria cilíndrica, que foi refinada (aumentando o número de triângulos por unidade de área) no centro da superfície que servira para disposição das partículas. Caso isso não tivesse sido feito, quando da aplicação de elevados esforços de impacto ou compressão ocorreria a sobreposição da geometria com as esferas. Adicionalmente, é importante considerar que no módulo “*Geometries*” do software Rocky é permitida só a movimentação das geometrias de forma translacional, sendo limitados os movimentos rotacionais destas. Portanto, foi necessário criar e importar a geometria (barra da CCI) na direção final de trabalho. O processo descrito foi utilizado para modelar as geometrias dos cenários de impacto e de compressão testados aqui.

4.1.2.2 Calibração do FBM

A processo de calibração com o modelo de quebra FBM foi realizado em duas etapas. A primeira se baseou numa avaliação teórica e um exame rigoroso das expressões que definem a quebra. O alvo nessa parte do trabalho foi entender as premissas adotadas nos modelos originais em que foi baseado o modelo de quebra, a interpretação feita na implementação do modelo no software e as possíveis equivalências com modelos analíticos da literatura.

O modelo de quebra do software Rocky 3.11 é baseado nos modelos de probabilidade de quebra e de fragmentação t_{10} , os quais foram implementados respectivamente a partir dos trabalhos de VOGEL e PEUKERT (2005), e SHI e KOJOVIC (2007), respectivamente (POTAPOV e DONOHUE, 2013).

Com base no modelo de VOGEL e PEUKERT (2005) (Equação 2.4) pode-se identificar duas equivalências (Equação 4.1 e 4.2) para a obtenção da expressão implementada no software Rocky (Equação 4.3):

$$f_{mat} \equiv S/d_{i,ref} \quad \text{Eq. 4.1}$$

$$k(E - E_{min}) \equiv E_{cum} + (E - e_{min,ref}) \quad \text{Eq. 4.2}$$

$$P(E) = 1 - \exp(-S \cdot (d_i/d_{i,ref}) \cdot E_{cum}) \quad \text{Eq. 4.3}$$

Nas quais:

$$E'_{cum} = E_{cum} + E - E_{min} \quad \text{Eq. 4.4}$$

$$E_{min} = e_{min,ref}(d_{i,ref}/d_i) \quad \text{Eq. 4.5}$$

As equivalências assumidas nos parâmetros não modificam a resposta do modelo implementado (Equação 4.3) em relação ao modelo de base (Equação 2.4), sendo possível assumir que são matematicamente equivalentes.

O modelo t_{10} do SHI e KOJOVIC (2007) (Equação 4.6) foi construído a partir do modelo de probabilidade do VOGEL e PEUKERT (2005). A diferença entre estes reside num parâmetro, o parâmetro M , o qual define um limite máximo de crescimento na função (porcentagem máximo do t_{10}), a partir do qual mantem-se constante a curva. Do mesmo modo, a expressão implementada para o t_{10} no software Rocky (Equação 2.8) difere do modelo de probabilidade implementado em apenas um parâmetro:

$$t_{10} = M\{1 - \exp[-S \cdot (d_i/d_{i,ref}) \cdot E_{cum}]\} \quad \text{Eq. 4.6}$$

Considerando que as expressões usadas para construir o modelo de quebra em Rocky apresentam alguma equivalência com os modelos analíticos de TAVARES (1997, 2004) para probabilidade de quebra e t_{10} , respectivamente, o processo de calibração usou como base estes modelos analíticos, além de dados históricos da quebra de partículas do minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm presentes na base do LTM.

Com base no modelo analítico de TAVARES (1997), foram calibrados os parâmetros do FBM em termos da probabilidade de fratura da partículas seguindo duas etapas. Em uma primeira etapa foram programadas as funções de probabilidade

(TAVARES (1997), e VOGEL e PEUKERT (2005)) externamente do ambiente DEM, donde foram identificados os parâmetros capazes de alcançar equivalência entre os resultados desses modelos. A fonte de referência para isto foi a função que descreve a probabilidade de quebra do cobre de sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm, a qual apresenta energia média de fratura E_{m50} igual a 0,15 J e um desvio σ_m de 0,77. Em seguida, na segunda etapa, a partir desses parâmetros estimados, foram realizadas simulações em que se observou a correspondência das expressões implementadas no software com o resultado da simulação. O processo envolveu ensaios de impacto duplo com esfera de múltiplas partículas, nos quais foi quantificada a porcentagem de partículas quebradas. O resultado foi comparado com a probabilidade estabelecida nas expressões teóricas. A verificação da fragmentação seguiu a mesma sistemática.

4.1.3 Modelo de substituição de elementos - PRM

O modelo de substituição de elementos na sua forma implementada no EDEM é o mais simples dos três modelos de quebra estudados na presente pesquisa. Cabe ressaltar que a versão referenciada é a última desenvolvida para este software na presente época, na forma de uma API, tendo sido base o trabalho de BARRIOS e TAVARES (2016). A implementação feita é fiel ao modelo original proposto por CLEARY (2001).

Considerando as limitações da versão V2 do PRM implementada no EDEM na forma de APIs apresentada no Capítulo 2, considerou-se usar a versão V3, a qual possibilita a alocação de forças de quebra médias para cada tamanho de partícula. Além disso, essa versão permitiu um melhor gerenciamento da perda de massa, graças ao critério usado com partícula mínima limite, o qual restringe a quebra de partículas de tamanho imediatamente superior ao limite inferior, abaixo do qual as partículas substituídas são retiradas da simulação.

Na modelagem da quebra de partículas individuais usando o PRM, foram definidos os seguintes passos:

- Modelagem das partículas simuladas;
- Calibração dos parâmetros do modelo PRM.

4.1.3.1 Modelagem do PRM

Uma das motivações para o desenvolvimento do modelo de quebra PRM foi a necessidade de representar este fenômeno com um custo computacional menor àquele dos modelos BPM e DGB, já existentes na época (CLEARY, 2001).

As características do modelo que conduzem ao ganho computacional são: a ausência de fragmentos da quebra desde o início da simulação e o uso de elementos esféricos, os quais facilitam o cálculo numérico do contato. Cabe ressaltar que, embora o modelo original tenha sido representado e seja usado com base em partículas esféricas, isto não significa que o uso de geometrias irregulares seja impedido. No entanto, particularmente para a implementação usada neste trabalho as características da partícula mãe são replicadas nas partículas filhas, fato que ofereceria fragmentos pouco realistas com esforço computacional maior sem qualquer benefício aparente. Considerando isto, os formatos esféricos foram adotados como a alternativa mais favorável.

Assim, a modelagem da partícula individual se baseou na definição do diâmetro da esfera e dos parâmetros para o material e o contato, os quais foram previamente definidos no Capítulo 3. O tamanho estudado foi 5,47 mm, representativo da faixa de 6,3 x 4,75 mm. Da mesma forma, as características na quebra foram as do minério de cobre de Sossego, também já previamente definidas.

Considerando que a distribuição de tamanhos do produto da quebra faz parte dos critérios definidos pelo usuário, para este modelo foi necessário construí-la. O conjunto de fragmentos da quebra primária é o elemento mais básico para descrever um evento de quebra, já que esta medida exclui diversas variáveis que influenciam o resultado, tal como na quebra subsequente o de multi-etapas (SAEIDI *et al.*, 2016). Assim, mediante a modelagem buscou-se reproduzir um conjunto de fragmentos que apresentaram as características desta distribuição. Adicionalmente, a distribuição dos fragmentos foi modelada visando ao máximo a conservação da massa. Estabelecer mais critérios para a modelagem seria inapropriado, já que a fragmentação é um processo decorrente da intensidade de energia aplicada. Assim, embora sendo incongruente representá-la por meio de uma distribuição de tamanhos constante e discreta, é a característica da versão atual do PRM no EDEM. Cabe ressaltar que o tamanho das partículas substituídas é definido na forma de razões do tamanho da partícula mãe. Assim, evidentemente o efeito

de redução de tamanho é considerado na quebra subsequente. A sequência de substituição é restringida mediante o tamanho mínimo limite definido pelo usuário, o qual evita a quebra das partículas do limite inferior.

A modelagem dos fragmentos padrão de esferas filhas foi feita com base nos tamanhos representativos da distribuição granulométrica em uma progressão geométrica com razão $2^{1/4}$. Estes foram usados como referência para a construção da série geométrica de razões de um determinado tamanho: para este caso em relação a 5,47 mm (tamanho da partícula mãe). A conservação da massa dos fragmentos filhos em relação à partícula mãe foi avaliada estimando a massa da partícula mãe esférica e comparando-a à massa combinada do conjunto de esferas, e definido o conjunto mais próximo da massa da mãe. Os fragmentos usados consistem de três esferas de diferentes tamanhos. Definir um maior número de esferas para os fragmentos implicaria em aumento significativo do já grande esforço computacional na quebra subsequente, devido ao crescimento exponencial no número de esferas filhas.

Na Tabela 4.4 são apresentadas as características dos fragmentos padrão de partículas filhas modeladas. A Figura 4.7 compara a distribuição granulométrica dos fragmentos modelada à distribuição do produto construída usando o modelo de t_{10} e a função beta incompleta (CARVALHO, 2009), para um impacto equivalente a 50% da energia de quebra do cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm.

Tabela 4.4. Distribuição de fragmentos padrão modelado para o PRM para a partícula de 5,47 mm

Tamanho (mm)	Tamanho (razão)	Massa (g)	Massa padrão dos fragmentos (g)
5,47	1,0000	0,2511	
4,60	0,8409	0,1493	0,1493
3,87	0,7071	0,0888	
3,25	0,5946	0,0528	0,0528
2,74	0,5000	0,0314	0,0314
2,30	0,4204	0,0187	
Massa total (g)			0,2335

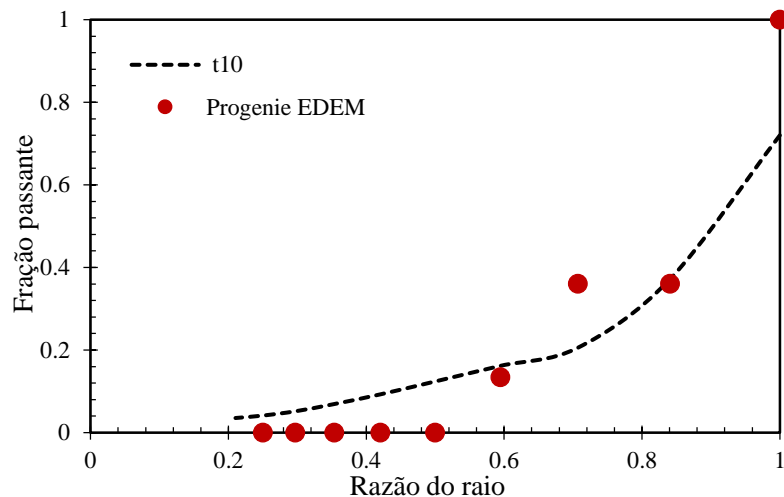


Figura 4.7. Modelagem da distribuição de tamanhos de fratura primária no PRM.

4.1.3.2 Calibração do PRM

A calibração do PRM na forma como usado foi uma tarefa comparativamente simples. Ela consiste em inserir a força de quebra desejada para cada tamanho de partícula, a qual o software interpreta aproximadamente como a medida do critério na qual a partícula substituirá pela distribuição dos fragmentos ou progênie. Cabe ressaltar que diversas condições da implementação afetam a resposta exata do modelo na simulação, sendo necessária um pequeno ajuste fino dos parâmetros. Para testar isto, foram realizados ensaios virtuais de compressão uniaxial, a partir dos quais foi extraído o perfil de força gerado na placa superior. Esta informação foi comparada e assim desenvolvido uma análise de sensibilidade até obter a medida de quebra para a partícula mãe e sucessivamente para os fragmentos da progênie.

A calibração feita com este modelo envolveu a força e a energia de quebra, sendo os outros parâmetros do modelo PRM implementado desconsiderados da calibração e estimados com base no trabalho de BARRIOS (2015). A Tabela 4.5 lista os cinco parâmetros da versão V3 do modelo PRM.

A calibração foi feita usando como referência o minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm, o qual apresenta uma energia de fratura média E_{m50} de 0,15 J.

No Anexo 1 são apresentadas algumas considerações a respeito do parâmetro: razão do raio limite inferior de partícula - $\phi_{L,p}$.

Tabela 4.5. Parâmetro dos modelos de quebra do PRM

Modelo de quebra	Parâmetro
Modelo de substituição de elementos	Razão do raio limite inferior de partícula - $\phi_{L,p}$
	Porcentagem da força de sobreposição das partículas filhas - b_L
	Máxima velocidade da progênie após a substituição - $v_{L,p}$
	Vetor da razão do raio das partículas filhas em relação à mãe - $\phi_{F,p}$
	Vetor de resistências crítica de fratura de partícula - $\sigma_{c(prm),p}$

4.2 Modelagem da quebra de leitos de partículas no ambiente de simulação DEM

Diferentes autores (BOURGEOIS, 1993; BARRIOS, 2010) estudaram a quebra de partículas em leitos por impacto como um microprocesso da cominuição importante no entendimento e modelagem de moinhos de bolas. O presente trabalho propõe realizar experimentos virtuais da quebra de leitos por impacto, os quais serão validados a partir de resultados de ensaios experimentais realizados por BARRIOS (2010).

Na Figura 4.8 é apresentada a comparação entre o sistema de impacto em leitos de laboratório e o impacto em leitos como simulado nos softwares EDEM e Rocky como parte do presente trabalho.

A réplica virtual dos cenários de experimentação foi feita para a compressão usando duas geometrias cilíndricas com movimento translacional; para impacto, usando uma geometria cilíndrica que replica a barra do experimento. Uma partícula esférica do tamanho adequado contendo as propriedades do aço foi usada para simular o impactor.

Para o impacto em leitos foram modelados diferentes arranjos geométricos de partículas, os quais estão baseados no modelo de captura de partículas desenvolvido por BARRIOS *et al.* (2011). Esses foram construídos considerando arranjos ideais, cuja configuração apresenta as características espaciais de uma estrutura cristalina hexagonal com diferentes anéis ($q = 1, 2, 3, \dots$) em torno de uma partícula central ($q=0$) (Figura 4.9). Adicionalmente, BARRIOS (2010) estudou o efeito da adição de múltiplas camadas de partículas densamente empacotadas.

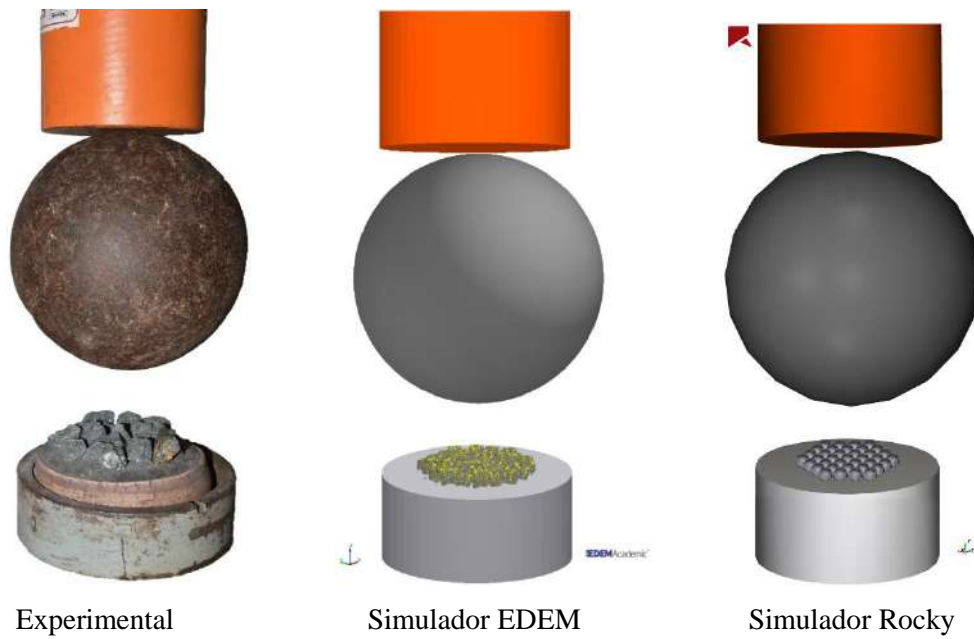


Figura 4.8. Impacto em leito de monocamada.

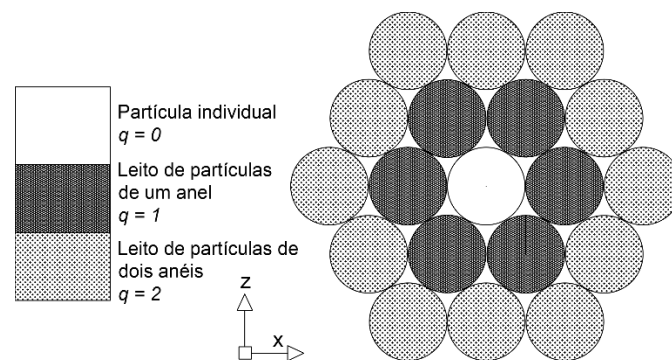


Figura 4.9. Ilustração do empacotamento denso de esferas por anéis.

A modelagem dos arranjos foi feita virtualmente com base nas considerações já descritas para as configurações dos leitos de partículas do trabalho de BARRIOS (2010). Assim, a sequência de empilhamento usada entre as camadas de partículas foi feita com base na estrutura cristalina hexagonal compacta, com diferentes camadas ($Q = 2, 3, 4, \dots$) localizadas sobre a camada base ($Q = 1$) (Figura 4.10). A Figura 4.11 ilustra em detalhe a sequência usada entre as camadas de partículas na presente pesquisa.

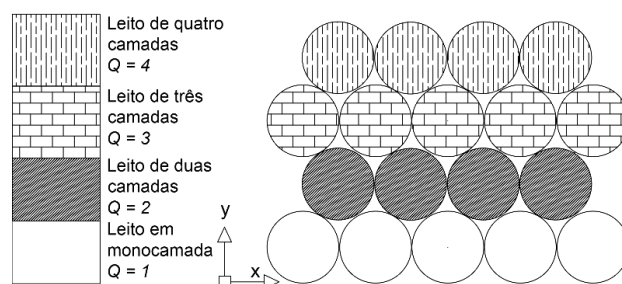


Figura 4.10. Ilustração de empacotamento denso por camadas.

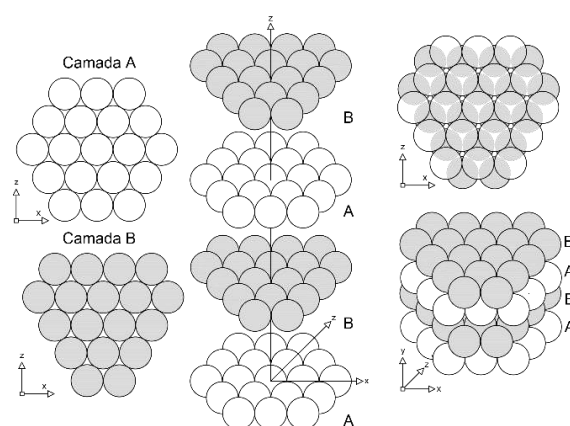


Figura 4.11. Ilustração da sequência de empilhamento entre camadas.

Na Tabela 4.6 são apresentadas as características das diferentes configurações usadas no presente estudo.

Tabela 4.6. Características dos arranjos de partículas usados na presente pesquisa.

Tipo de configuração	Número de anéis (q)	Número de camadas (Q)	Sequência camadas	Número total de partículas
Partícula individual	0	1	A	1
Leito de um anel de partículas	1	1	A	7
Leito de dois anéis de partículas	2	1	A	19
Leito de três anéis de partículas	3	1	A	37
Leito de quatro anéis de partículas	4	1	A	61
Leito de duas camadas de partículas	4	2	AB	121
Leito de três camadas de partículas	4	3	ABA	182
Leito de quatro camadas de partículas	4	4	ABAB	242
Leito de cinco camadas de partículas	4	5	ABABA	303

4.2.1 Modelagem de leitos de partículas no modelo BPM

Os leitos de partículas de 6,3 x 4,75 mm no BPM foram modelados usando oito metapartículas diferentes, as quais foram construídas independentemente e suas características apresentadas na Tabela 4.7.

Na Figura 4.12 (a) é apresentado o arranjo de um anel (7 partículas). A coordenada do centro de massa de cada esfera nesta configuração ideal foi usada como ponto de referência espacial para a localizar cada uma das metapartículas modeladas, tal como é apresentado na Figura 4.12 (b), segundo a configuração para cada um dos cenários estudados.

Com base nas metapartículas *P1*, *P2*, *P3*, *P4*, *P5*, *P6*, *P7* e *P8* foram construídas as diferentes configurações de leitos de metapartículas assegurando a presença de cada um dos aglomerados (*clusters*) modelados proporcionalmente em número em relação ao número de partículas no leito. Por exemplo, no leito de um anel, o qual apresenta sete partículas, foi construído usando uma vez só com cada uma das metapartículas *P1* a *P8*.

Tabela 4.7. Características da distribuição de esferas usada para modelar cada metapartícula

Formato	ID	Tipo de distribuição	Média (mm)	Desvio padrão (mm)	Tamanho mínimo (mm)	Tamanho máximo (mm)	Número total de esferas
Partícula de minério de cobre de Sossego 5,47 mm	P1	Normal	0,528	0,160	0,42	1,33	545
	P2	Normal	0,529	0,159	0,42	1,27	551
	P3	Normal	0,521	0,151	0,42	1,25	570
	P4	Normal	0,523	0,155	0,42	1,36	560
	P5	Normal	0,526	0,152	0,42	1,36	560
	P6	Normal	0,539	0,162	0,42	1,36	528
	P7	Normal	0,521	0,157	0,42	1,40	561
	P8	Normal	0,535	0,170	0,42	1,42	526

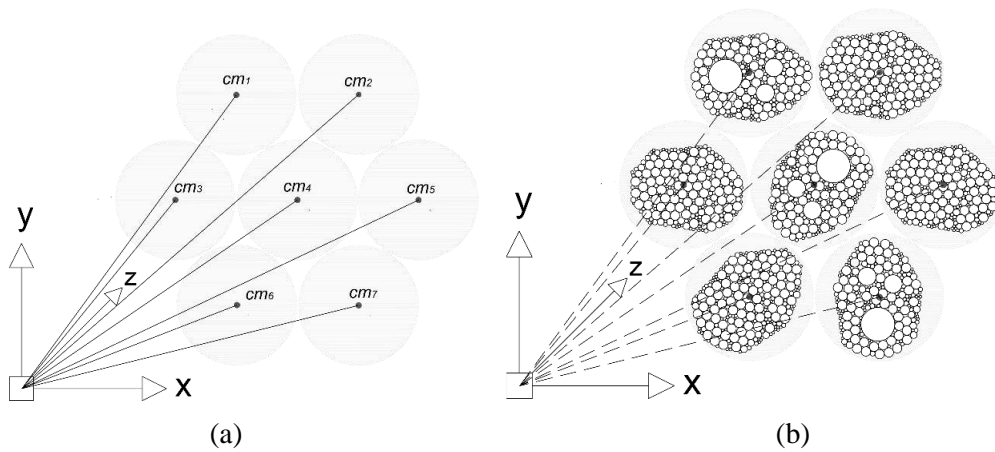


Figura 4.12. Ponto de referência do leito $q=0$ para localização das metapartículas.

Para realizar isto, foi programada uma rotina no software MATLAB® para escolher, aleatoriamente, cada uma das metapartículas modeladas, extraindo as coordenadas e diâmetros da sua distribuição de esferas. Posteriormente é estabelecida a configuração do leito para modelar, de maneira que é escolhida aleatoriamente uma das posições (vacantes para metapartículas) deste arranjo, e são extraídas as coordenadas do centro de massa da posição. Por fim, as coordenadas da distribuição de esferas da metapartícula escolhida são posicionadas no centro de massa da partícula vacante. Evidentemente, as posições - cm do arranjo escolhido podem ser ocupadas uma vez só, enquanto as metapartículas podem ser usadas repetidamente até completar a quantidade de metapartículas da configuração de arranjo escolhido. Na Figura 4.13 é apresentado um fluxograma detalhado da rotina descrita previamente. Na Figura 4.12 é ilustrado o processo descrito: neste esquema é apresentada a configuração do leito de um anel ($q=1$ e $Q=1$) com as respectivas sete lacunas e seus respectivos centros de massa (cm_i), os quais serviram de referência para a locação dos diferentes aglomerados.

A API descrita no algoritmo foi discutida previamente para o uso em substituição de partículas individuais. Esta rotina foi de vital importância na presente pesquisa, pois por meio dela foi possível extrapolar as informações da partícula individual (coordenadas e diâmetros das esferas) para a geração de múltiplas partículas em diferentes posições (Figura 4.14). Não obstante, foi necessário definir uma distância adequada entre cada metapartícula a fim de evitar que fossem criadas ligações entre estas.

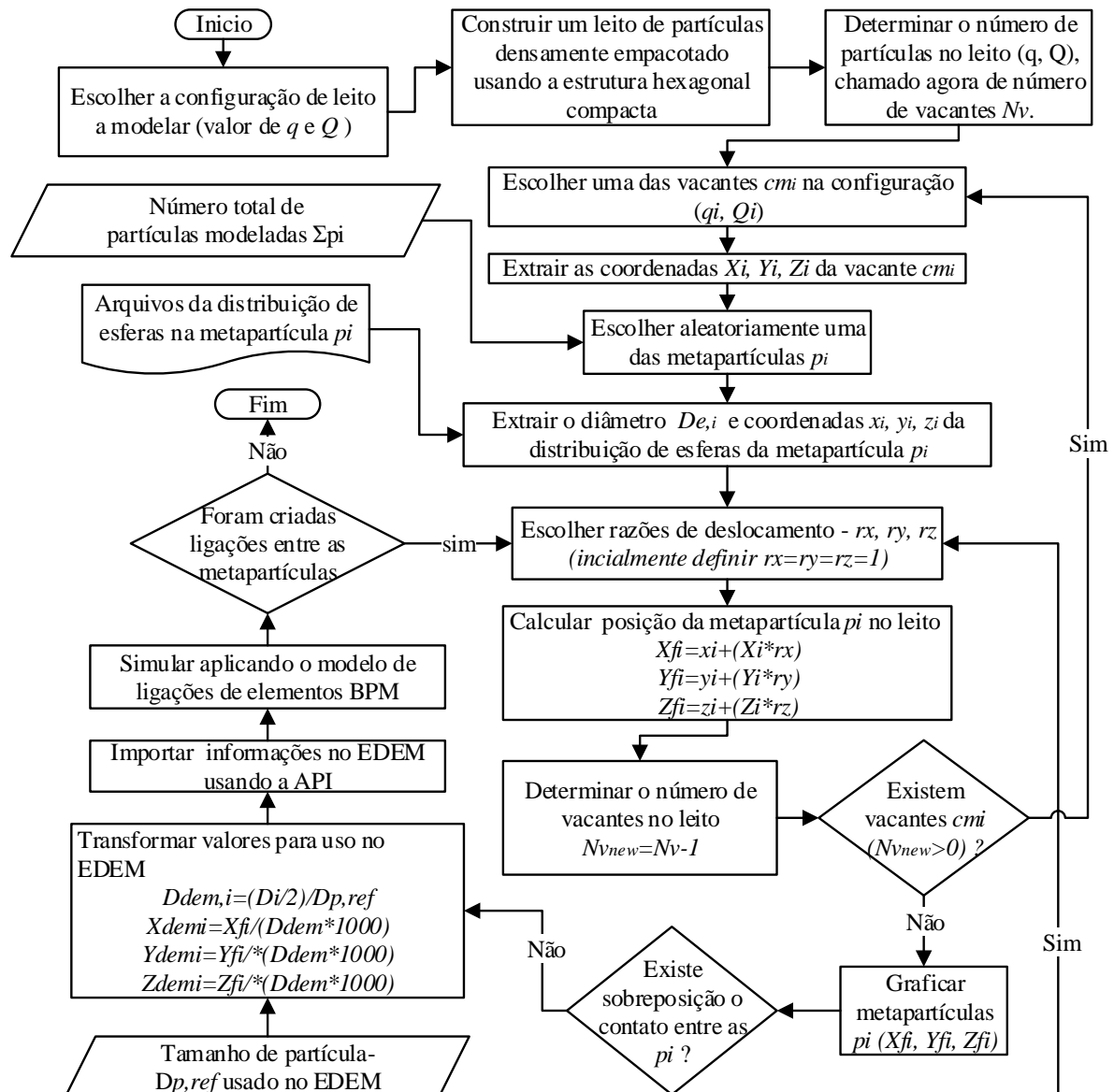


Figura 4.13. Algoritmo para locação de metapartículas num arranjo.

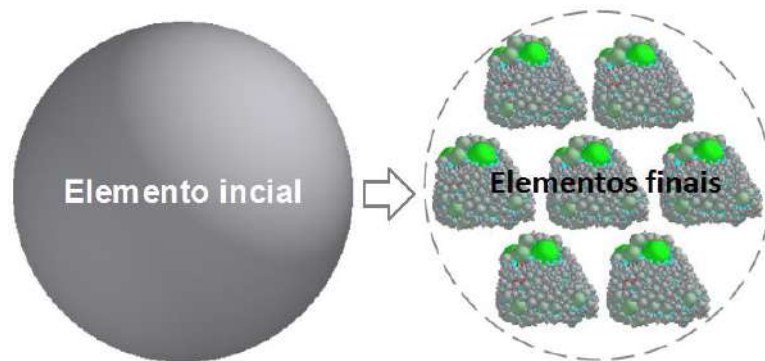


Figura 4.14. Processo de substituição de elementos para leitos de partículas usando API.

Considerando que existe uma distância de pseudo-contato na qual o modelo BPM cria ligações, a distância entre as metapartículas foi otimizada, incrementando-a e, assim, eliminando a ocorrência deste evento. A distância inevitavelmente inserida entre as metapartículas pôde ser posteriormente eliminada na simulação por meio do uso de um procedimento de empacotamento, no qual um sistema de geometrias disposto no contorno do leito era movimentado de fora para o centro do leito. A fim de preservar a integridade das metapartículas a velocidade de movimentação usada foi muito baixa. Esse processo é ilustrado na Figura 4.15.

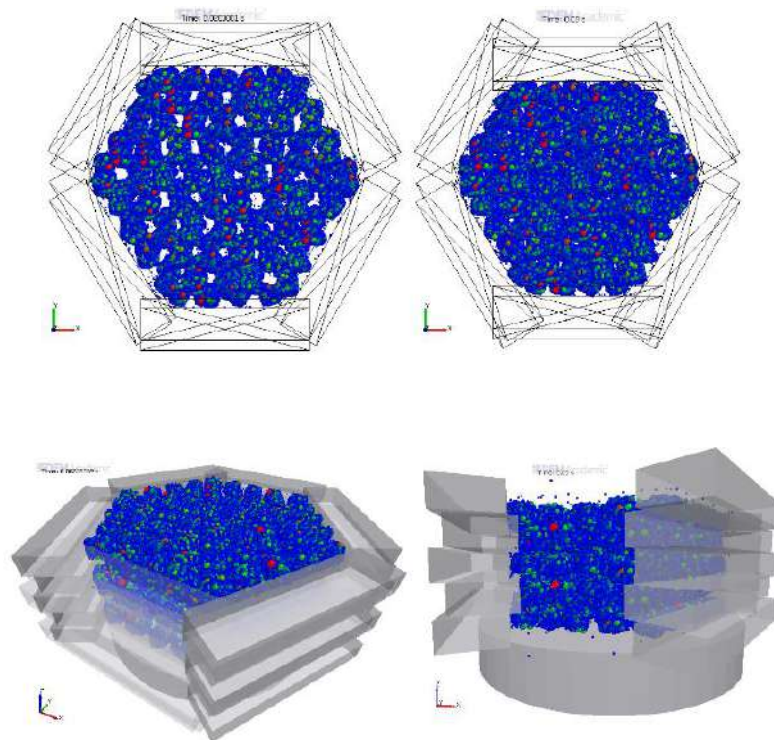


Figura 4.15. Processo usado na aproximação dos aglomerados no software EDEM previamente ao impacto em leitos.

Na Tabela 4.8 são listados os experimentos virtuais de impacto de leitos desenvolvidos com o modelo BPM. Nesta pode se observar dois conjuntos de experimentos, os desenvolvidos como testes exploratórios (análise de sensibilidade do modelo) e os desenvolvidos para validação do modelo em relação à resistência média do minério de cobre de Sossego.

Tabela 4.8. Características dos experimentos virtuais com arranjos de partículas para BPM

Tipo de configuração	Número total de partículas	Testes exploratórios		Validação do modelo	
		Energias de impacto (J)	Diâmetro das bolas usadas (mm)	Energias de impacto (J)	Diâmetro das bolas usadas (mm)
Partícula individual	1	1,5 / 3,0 / 9,0	40 / 88	1,5/3,0/9,0	88
Leito de um anel	7	1,5 / 3,0 / 9,0	40 / 88	3,0	88
Leito de dois anéis	19	1,5 / 3,0 / 9,0	40 / 88	3,0	88
Leito de três anéis	37	1,5 / 3,0 / 9,0	40 / 88	1,5/3,0/9,0	88
Leito de quatro anéis	61	1,5 / 3,0 / 9,0	88	3,0	88
Leito de três camadas	182	1,5 / 9,0	88	3,0	88
Leito de cinco camadas	303	1,5 / 9,0	88	3,0	88
Número total de experimentos:		31		11	

4.2.2 Modelagem de leitos de partículas no modelo FBM

A criação das partículas individuais foi feita na interface do Rocky usando as fábricas predefinidas do software. Todas as partículas que conformam os leitos apresentam o mesmo formato, com os mesmos parâmetros. A locação de cada partícula no respectivo arranjo foi feita criando uma fábrica na posição do centro de massa de cada partícula em cada configuração. As configurações de leitos de partículas testadas com o FBM são apresentadas na Tabela 4.9. Os experimentos descritos nesta correspondem à validação do modelo em relação às partículas do minério de cobre de Sossego.

Tabela 4.9. Característica dos experimentos virtuais com arranjos de partículas no FBM

Tipo de configuração	Número total de partículas	Energias de impacto (J)	Diâmetro das bolas usadas (mm)
Partícula individual	1	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Leito de um anel	7	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Leito de dois anéis	19	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Leito de três anéis	37	1,5 / 3,0 / 9,0	40 / 88
Leito de quatro anéis	61	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Leito de três camadas	182	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Leito de cinco camadas	303	1,5 / 3,0 / 9,0	88
Número total de experimentos:			26

4.2.3 Modelagem de leitos de partículas no modelo PRM

Para modelagem dos leitos de partículas do PRM o método usado foi o mesmo descrito para a modelagem feita para o BPM e FBM: criar arranjos de partículas empacotadas com base na estrutura hexagonal em configurações de anéis e camadas, tal como ilustrado nas Figuras 4.9, 4.10 e 4.11. As configurações de leitos de partículas testadas com o PRM são apresentadas na Tabela 4.10. Nesta, observam-se dois conjuntos de experimentos, os desenvolvidos para exploração do modelo (análise de sensibilidade) e os correspondentes à validação do modelo em relação as partículas do minério de cobre do minério de Sossego.

O cenário usado para realizar os experimentos com leitos de partículas envolve o uso de uma bola como impactor. Tal como descrito para o BPM e o FBM, aqui também foi usado um elemento esférico definido como aço. No entanto, existe um sério limitante para isto no caso deste modelo, já que a rotina do PRM considera a substituição das partículas esféricas independentemente do tipo de material, de maneira que se não fossem corretamente definidos os parâmetros, poderia ocorrer a substituição mesmo da esfera de aço em determinadas intensidades de energia. Para evitar isto, foi definida uma força de quebra extremamente alta para a esfera que atua como o impactor, evitando assim a sua substituição nos impactos de alta energia.

Tabela 4.10. Características dos experimentos virtuais com arranjos de partículas no PRM

Tipo de configuração	Número total de partículas	Testes exploratórios		Validação do modelo	
		Energias de impacto (J)	Diâmetro das bolas usadas (mm)	Energias de impacto (J)	Diâmetro das bolas usadas (mm)
Partícula individual	1	1,5/3,0/9,0	40/88	3,0	88
Leito de um anel	7	1,5/3,0/9,0	88	3,0	88
Leito de dois anéis	19	1,5/3,0/9,0	88	3,0	88
Leito de três anéis	37	1,5/3,0/9,0	40/88	3,0	88
Leito de quatro anéis	61	1,5/3,0/9,0	88	3,0	88
Leito de dois camadas	121	1,5/3,0/9,0	88	-	-
Leito de três camadas	182	1,5/3,0/9,0	88	3,0	88
Leito de quatro camadas	242	1,5/3,0/9,0	88	-	-
Leito de cinco camadas	303	1,5/3,0/9,0	88	3,0	88
Número total de experimentos:		33		7	

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O presente capítulo está dividido em quatro partes: Caracterização do material modelo, análise de sensibilidade dos modelos, validação dos modelos e proposta conceitual de um modelo de quebra avançado.

5.1 Caracterização do material modelo

Os ensaios de compressão uniaxial realizados com cem partículas individuais de minério de cobre na faixa de 9,5 x 6,3 mm permitiram determinar os tipos de perfis esforço-deformação característicos para este material, bem como a força e a energia média de fratura. Na Figura 5.1 são apresentados alguns dos perfis de esforço-deformação tipicamente encontrados por meio destes testes, os quais podem se definir como os mais representativos da população.

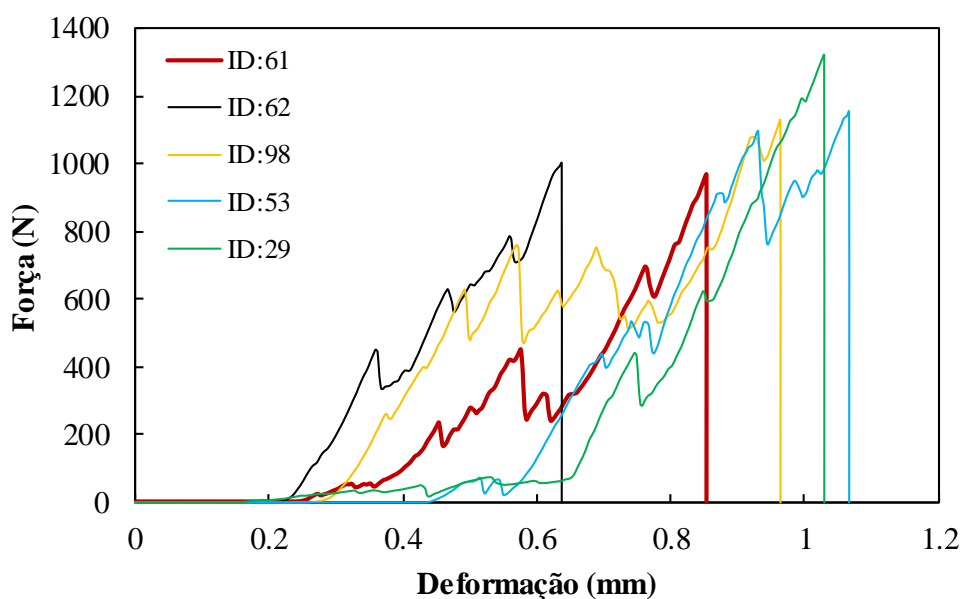


Figura 5.1. Amostra representativa de perfis esforço-deformação de ensaios de quebra de partículas individuais de 9,5 x 6,3 mm em compressão uniaxial.

A distribuição de forças e energias de quebra obtida nos ensaios com a população de partículas é apresentada na Figura 5.2. Nesta observam-se, adicionalmente, os

indicadores estatísticos da média, mediana e desvio padrão correspondentes para força e energia de fratura.

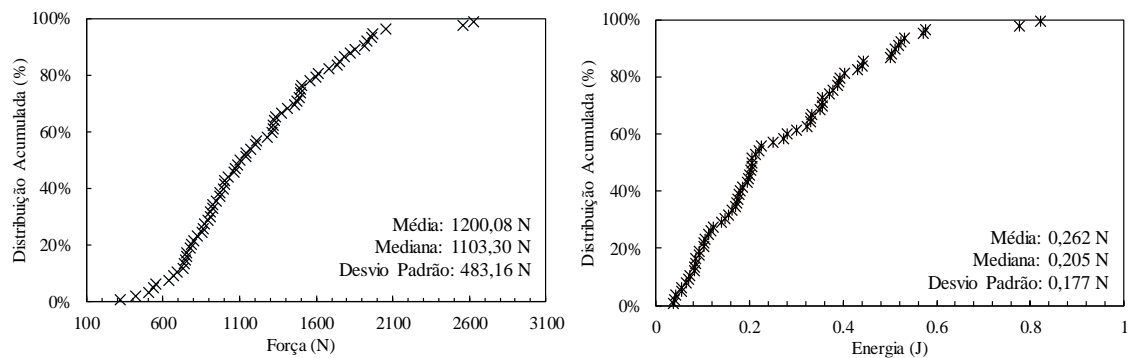


Figura 5.2. Distribuição de forças de fratura (esquerda) e de energias de fratura (direita) de partículas de minério de cobre de Sossego (9,5 x 6,3 mm) por compressão.

Na Figura 5.3 é apresentada a partícula *ID 61* e os seus fragmentos após o ensaio de compressão uniaxial. Estes fragmentos podem ser considerados a quebra primária do minério, considerando que durante o teste a barra superior do equipamento desceu até o ponto no qual a partícula fraturou, mostrando um pico de queda significativo no perfil esforço-tempo (SAEIDI et al., 2016).



Figura 5.3. Partícula individual ID61 submetida a compressão uniaxial: Partícula sem fraturar (esquerda), fragmentos após a quebra (direita).

A distribuição de tamanhos acumulada resultante da soma dos fragmentos da quebra primária das 100 partículas testadas é apresentada na Figura 5.4

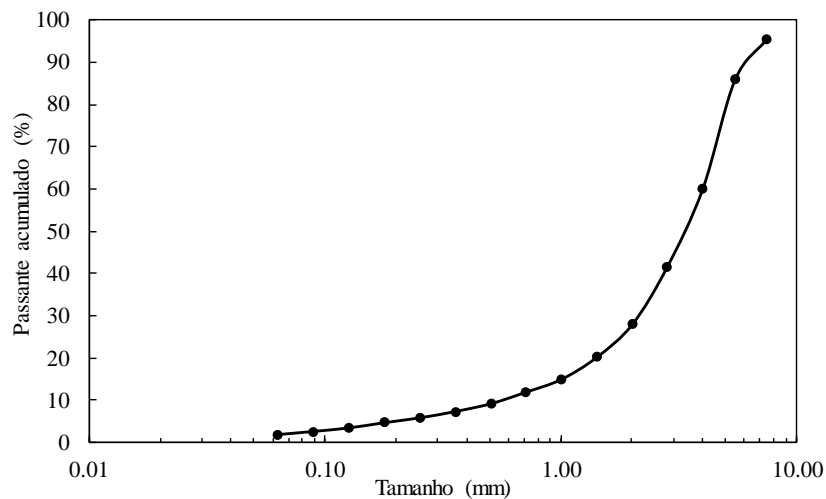


Figura 5.4. Distribuição da quebra primária de cem partículas individuais de 9,5 x 6,3 mm do minério de cobre de Sossego, fraturadas por compressão uniaxial.

5.1.1 Parâmetros dos materiais

Nesta seção são apresentados os parâmetros compilados da literatura e os obtidos por calibração, os quais caracterizam as diferentes propriedades dos materiais envolvidas nos ensaios virtuais. Na Tabela 5.1 são resumidos os parâmetros usados como base para os modelos analíticos usados na presente pesquisa. Por outro lado, nas Tabelas 5.2, 5.3 e 5.4 são apresentados os parâmetros fornecidos aos softwares DEM para os materiais simulados.

Tabela 5.1. Parâmetros dos materiais usados nos modelos analíticos.

Relação		Parâmetro	Valor	Unidades
Propriedades físicas	1	Massa específica - ρ	2,93	(g/cm3)
	2	Fator de Forma - β'	0,62	(-)
Distribuição de energia de fratura	4	$E_{m,\infty}$	213,5	(J/kg)
	5	d_o	8,073	(mm)
	6	ϕ	1,219	(-)
	7	σ_∞	0,608	(-)
	8	d'	0,837	(mm)
	9	θ	0,618	(-)
Rigidez	10	Minério Cobre - k_p	5,0	(GPa)
	11	Aço - $k_{Aço}$	236	(GPa)
Modelo de t_{10}	12	A	67,71	(%)
	13	b	0,0294	(-)
Função beta incompleta	14	$\alpha_{1,2} / \beta_{1,2}$	0,505/11,95	(-)
	15	$\alpha_{1,5} / \beta_{1,5}$	1,066/13,87	(-)
	16	α_2 / β_2	1,014/8,088	(-)
	17	α_4 / β_4	1,084/3,027	(-)
	18	α_{25} / β_{25}	1,012/0,527	(-)
	19	α_{50} / β_{50}	1,026/0,363	(-)
	20	α_{75} / β_{75}	1,034/0,295	(-)
Modelo de captura	22	a_c	0,3621	(-)
	23	b_c	0,1517	(-)
	24	c_c	0,4125	(-)

Tabela 5.2. Parâmetros individuais dos materiais fornecidos ao DEM.

Parâmetro	Valor		Unidades
	Minério	Aço	
1 Coeficiente de Poisson	0,25	0,3	(-)
2 Módulo de Cisalhamento	2,08E+10	7,00E+10	Pa
3 Módulo de Young	5,20E+10	1,82E+10	Pa

Tabela 5.3. Parâmetros de contato dos materiais (preliminares) fornecidos ao DEM.

Parâmetro	Valor			Unidades
	Minério/Minério	Minério/Aço	Aço/Aço	
1 Coeficiente de restituição - e	0,48	0,39	0,5	(-)
2 Coeficiente de atrito estático - μ_s	0,49	0,5	0,5	(-)
3 Coeficiente de atrito dinâmico - μ_d	0,49	0,5	0,5	(-)
3 Coeficiente de rolamento - μ_r	0,02	0,01*	0,01	(-)

* Resistência ao rolamento da bola no software Rocky.

Tabela 5.4. Parâmetros de contato dos materiais (calibrados) fornecidos ao DEM.

Parâmetro	Modelo <i>PRM</i>			Modelo <i>FBM</i>		
	Minério/ Minério	Minério/ Aço	Aço/ Aço	Minério/ Minério	Minério/ Aço	Aço/ Aço
1 e	*	*	*	*	*	*
2 μ_s	*	*	*	0,16	*	*
4 μ_d	*	*	*	0,16	*	*
3 μ_r	0,027	*	*	0**	*	*

*Propriedades não submetidas a calibração.

**Resistência ao rolamento do minério no software Rocky.

5.1.2 Parâmetros dos modelos de quebra DEM

Nesta seção são apresentados os resultados dos parâmetros estimados para os três modelos de quebra de partículas simuladas no DEM usados na presente pesquisa.

5.1.2.1 Parâmetros do modelo BPM

Nesta seção são apresentados os parâmetros preliminares usados para o estudo exploratório do modelo e a sua análise de sensibilidade. Adicionalmente, são apresentados os parâmetros calibrados do modelo usando as informações de referência do minério de cobre de Sossego. A calibração foi desenvolvida para atingir uma energia de quebra de 0,15 Joules, correspondente à energia média de fratura das partículas do cobre de Sossego na faixa de tamanho de 6,3 x 4,75 mm. Ambos os conjuntos de parâmetros usados são reportados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5. Parâmetros preliminares e calibrados para o modelo de quebra BPM.

Parâmetros	Valor		Unidades
	Preliminares	Calibrados	
1 Rigidez normal - kbn .	2,0E+12	9,0E+11	N/m ³
2 Rigidez cisalhante - kbt .	3,0E+11	9,0E+11	N/m ³
3 Esforço crítico normal - σ_{cr} .	3,5E+07	1,0E+07	Pa
4 Esforço crítico cisalhante - τ_{cr} .	9,0E+06	9,0E+06	Pa
5 Raio do disco da ligação - bdr .	1	1	mm

5.1.2.2 Parâmetros do modelo FBM

Por meio da simulação e com base nos parâmetros apresentados na Tabela 5.6 conseguiu-se a calibração da probabilidade de quebra de partículas individuais de 6,3 x 4,75 mm em relação à função de probabilidade do modelo de TAVARES (1997) para o minério de cobre de Sossego.

Tabela 5.6. Parâmetros preliminares e calibrados para o modelo de quebra FBM.

Parâmetro	Valor		Unidades
	Preliminares	Calibrados	
1 Tamanho de partícula - d_i	5,47	5,47	mm
2 Tamanho de partícula equivalente	4,82	4,82	mm
3 Tamanho mínimo simulado	0,40	0,25	mm
4 Tamanho de referência - $d_{i,ref}$	5,00	5,00	mm
5 Energia mínima de referência - $e_{min,ref}$	100	100	J/kg
6 Coeficiente da função seleção - S	0,002	0,002	kg/J
7 Máximo valor de t_{10} - M	67,7	67,7	(-)

5.1.2.3 Parâmetros do modelo PRM

Nesta seção são apresentados os parâmetros preliminares empregados para o estudo exploratório do modelo (Tabelas 5.7 e 5.8) e os parâmetros calibrados do modelo usando as informações de referência do minério de cobre de Sossego (Tabela 5.9). A calibração foi desenvolvida para atingir uma energia de quebra de 0,15 Joules

correspondente à energia média de fratura das partículas do minério de cobre de Sossego na faixa de tamanho de 6,3 x 4,75 mm.

Tabela 5.7. Parâmetros preliminares para o modelo PRM – Parte 1.

Parâmetro	Valor		Unidades
	Exploração 1	Exploração 2	
Razão do raio limite inferior de partícula - $\phi_{L,p}$	0,13	0,13	(-)
Razão da força de sobreposição das partículas filhas - b_L	0,3	0,3	(-)
Máxima velocidade da progênie após a substituição - $v_{L,p}$	1,0	0,1	(-)

Tabela 5.8. Parâmetros preliminares para o modelo PRM – Parte 2.

Parâmetro	Tamanho (mm)	Valor		Unidades
		Exploração 1	Exploração 2	
Resistência crítica de fratura de partícula - $\sigma_{c(prm),p}$	5,47	1968,1	3837,7	(-)
	4,60	1397,2	2724,5	(-)
	3,87	917,1	1788,3	(-)
	3,25	660,4	1287,8	(-)
	2,74	444,5	866,8	(-)
	2,30	323,8	631,4	(-)
	1,93	222,2	433,4	(-)
	1,63	163,1	317,9	(-)

Tabela 5.9. Parâmetros calibrados para o modelo PRM.

Parâmetro		Valor		Unidades
Tamanho (mm)	5,47	4,6 - 1,15	0,97	(mm)
$\sigma_{c(prm),p}$	90	0	80	(-)
$\phi_{L,p}$		0,13		(-)
b_L		0,3		(-)
$v_{L,p}$		0,1		(-)

5.2 Análise de sensibilidade dos modelos de quebra

Na presente seção são compilados os resultados dos ensaios virtuais de impacto de leitos de partículas com bola usando os modelos de BPM e PRM. Foram analisados os efeitos da mudança das variáveis: energia aplicada, tamanho da bola e configuração do leito sobre a resposta na quebra das partículas. As variáveis de saída medidas foram: raio de captura de partículas, massa de partículas quebrada e fragmentação.

5.2.1 Análise de sensibilidade do BPM

A análise de sensibilidade para o modelo de ligação de elementos foi aplicada nas simulações dos microprocessos de quebra de partículas individuais e impacto de leitos de partículas usando uma bola de aço.

5.2.1.1 Definição de parâmetros do modelo

Os parâmetros usados nesta etapa exploratória não foram alvo de calibração em relação a um minério de referência específico, contudo, o comportamento mecânico do tipo de material estudado (minério) foi modelado e simulado. Assim, o perfil esforço-deformação representativo das partículas de minério de cobre foi usado como referência. Na Figura 5.5 é comparado o perfil esforço-deformação simulado e diversos perfis experimentais para uma partícula com energia média de quebra - E_{m50} de 0,42 J. A seleção da curva de referência (ID29) foi realizada considerando a sua representatividade dentro da população de 100 partículas deste minério testadas experimentalmente.

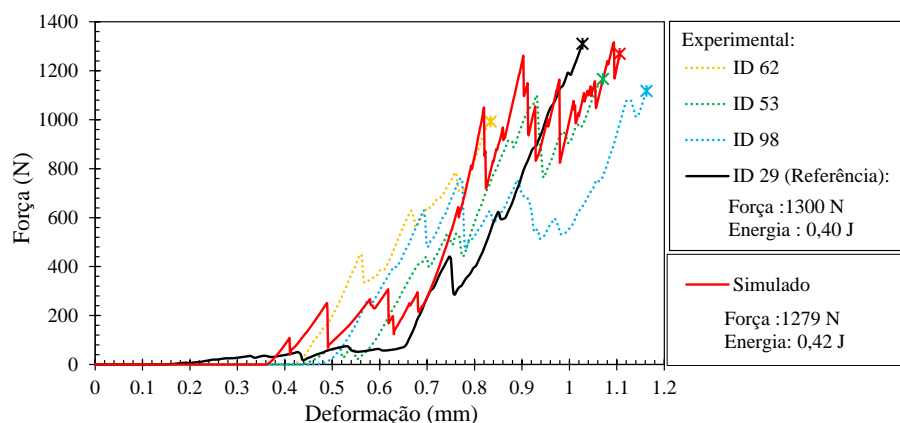


Figura 5.5. Comparação do perfil esforço deformação simulado com diferentes perfis esforço-deformação experimentais para o minério de cobre de Sossego.

5.2.1.2 Probabilidade de quebra da partícula individual

A probabilidade de quebra foi avaliada com base na resistência das diferentes metapartículas modeladas ($P1$, $P2$, $P3$, $P4$, $P5$, $P6$, $P7$, $P8$), ou seja, a partir da variabilidade inserida por meio do conjunto de esferas usado para modelar cada metapartícula. Os ensaios de compressão desenvolvidos com cada cluster mostraram pouca variabilidade na sua resistência à fratura (Figura 5.6). Cada ponto corresponde à energia de quebra da metapartícula e o número de ligações quebradas acumulado até o instante de tempo da fratura. Neste gráfico também é apresentada a comparação com o modelo analítico de probabilidade de TAVARES e KING (1998) para uma resistência média de 0,42 J e desvio padrão de 0,77 J (desvio usual das partículas do minério de cobre de Sossego). É observada pouca aderência entre a curva simulada e o modelo analítico para o desvio padrão inserido, usando como referência a variabilidade presente no minério de cobre de Sossego. Isto reflete a pouca variabilidade de resistências das metapartículas modeladas. Dentro das alternativas que poderiam ser usadas para resolver a pouca variabilidade estão:

- Considerando que cada cluster foi modelado com a mesma média e desvio padrão da distribuição de esferas (elementos), usar médias e desvios padrão diferentes por cada metapartícula permitiria aumentar a variabilidade da resistência à fratura. O processo ofereceria diferenças na distribuição das ligações para cada metapartícula, as quais são responsáveis da sua resistência.
- Usar parâmetros de resistência variáveis para cada metapartícula. O processo implicaria customizar a rotina de substituição existente, permitindo a criação de ligações com diferentes parâmetros de resistência. Esta opção não se encontra atualmente disponível no software EDEM.

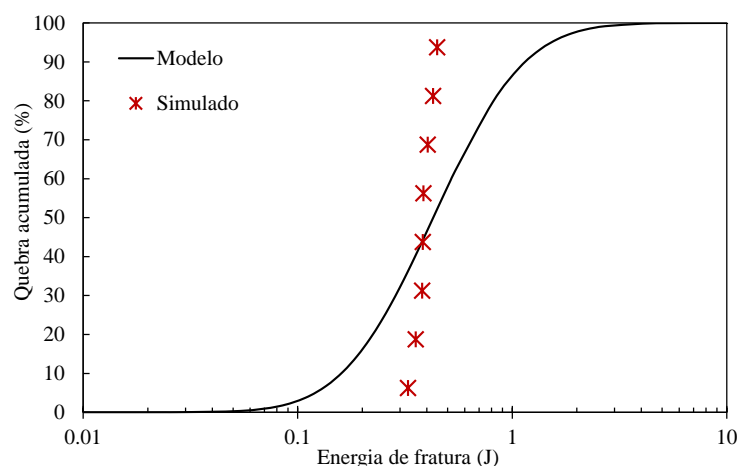


Figura 5.6. Comparação da função de probabilidade de fratura entre a simulação e o modelo analítico de TAVARES e KING (1998).

É importante ressaltar que a resistência dos diferentes aglomerados apresentada na Figura 5.6 foi medida submetendo as metapartículas a esforços na posição mais estável do corpo (Figura 5.7 - a), ou seja, compressão na orientação na qual o corpo apresenta o menor diâmetro.

A heterogeneidade das esferas na metapartícula implica em variação da sua resistência em relação à orientação do esforço. Isto foi evidenciado por meio dos ensaios de compressão conduzidos em duas orientações de carregamento sobre a metapartícula *PI* (Figura 5.7 – (a) e (b)). Os resultados mostraram variação na força e energia de fratura, tal como visto nos perfis esforço-deformação apresentados na Figura 5.7 – (c). Embora a orientação de carregamento apresente efeitos na resistência das metapartículas, incorporar este efeito a fim de melhorar o ajuste das curvas de probabilidade (Figura 5.6) não é suficiente e, além disso, não é um procedimento válido, já que a resistência média obtida a partir de ensaios em diferentes orientações poder ser da mesma magnitude para cada metapartícula, devido à semelhança da distribuição de esferas entre todas as metapartículas, e o mesmo tipo de formato usado.

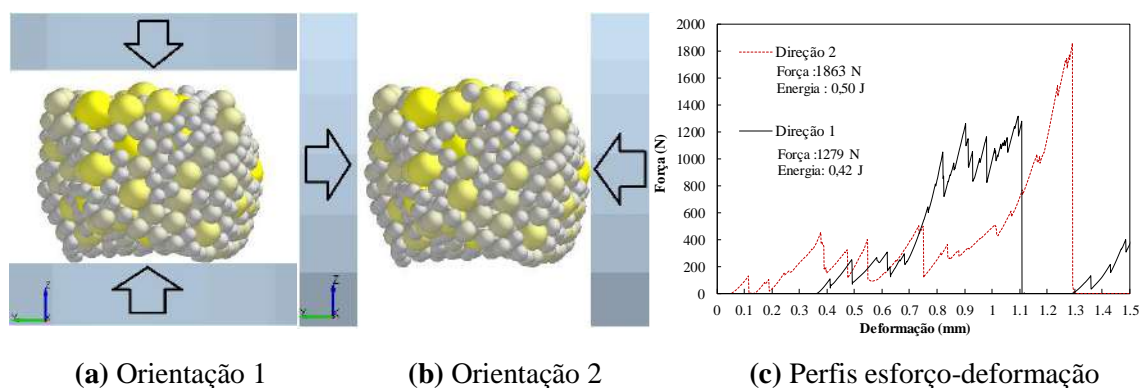


Figura 5.7. Efeito da orientação do carregamento num ensaio virtual de compressão sobre uma metapartícula individual.

5.2.1.3 Efeito da energia aplicada na quebra de partículas individuais

O efeito da energia aplicada sobre o enfraquecimento das metapartículas foi avaliado por meio de dois tipos de ensaios virtuais: impacto único em diferentes energias e impactos repetidos de energia constante em baixa magnitude. Para ambos os casos o impactor usado foi uma bola de aço. A resposta nos ensaios foi avaliada por meio da percentagem de ligações quebradas no aglomerado, a qual é um equivalente da fragmentação do material ou do seu dano. Para o primeiro caso, os resultados mostraram um aumento no número de ligações quebradas com o aumento da energia aplicada. O efeito foi obtido com as oito metapartículas testadas, como apresentado na Figura 5.8. Cada ponto do gráfico corresponde ao impacto de uma partícula com uma energia dada e as resultantes ligações quebradas.

Por outro lado, o enfraquecimento em impactos repetidos de baixa magnitude (segundo caso) foi avaliado usando dois valores de energia: 0,075 e 0,022 Joules. Na Figura 5.9 observa-se que oito impactos de 0,075 J foram suficientes para quebrar mais do 50 % das ligações da metapartícula. Entretanto, foram necessários mais de 25 impactos com energia 0,022 J para atingir o 20 % das ligações quebradas. Cabe ressaltar que a metapartícula testada (P1) foi a mesma nos dois casos. Adicionalmente, para a energia de 0,072 J a metapartícula fraturou em clivagem no oitavo impacto, mas, no segundo caso (0,022 J) a partícula só perdeu pequenos fragmentos (esferas) em todos os impactos.

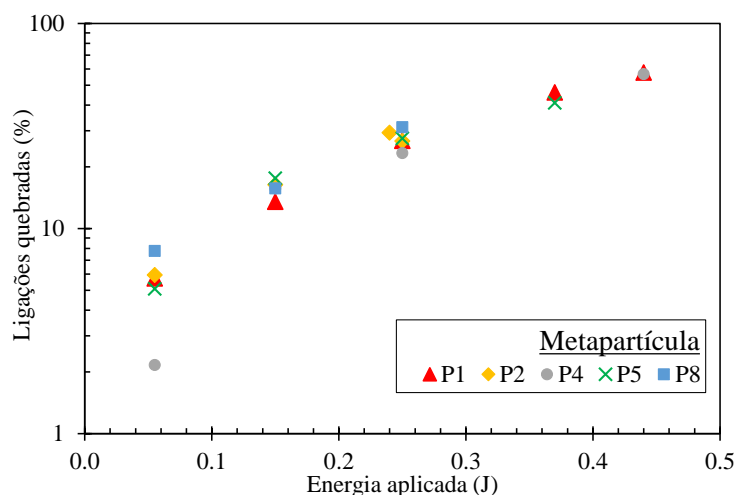


Figura 5.8. Efeito da energia aplicada sobre a quebra (número de ligações quebradas).

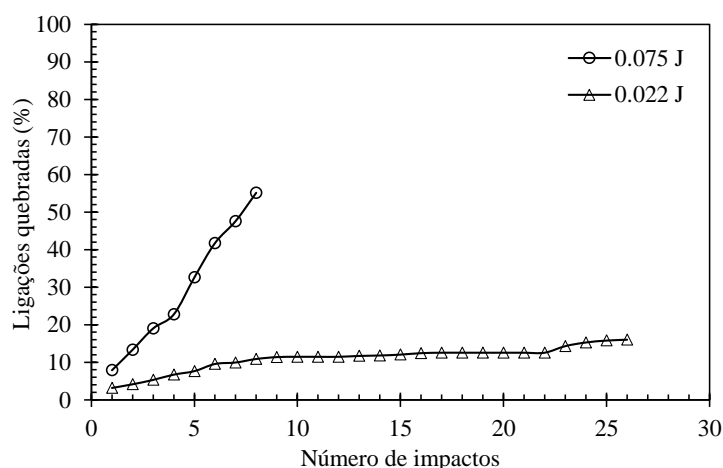


Figura 5.9. Efeito dos impactos repetidos sobre o enfraquecimento das metapartículas.

A curva de razão de dano permite medir o processo de enfraquecimento das partículas submetidas a esforço no tempo. A medida usada para isto é a percentagem acumulada de ligações quebradas no tempo. Na Figura 5.10 - esquerda, é apresentada a razão de dano de três eventos simples de quebra por impacto de uma partícula individual em três energias de diferentes magnitudes. Nesta, é possível identificar curvas de diferentes declives, os quais estão relacionados com a taxa de enfraquecimento e fratura das partículas, sendo maior para as energias de impacto mais altas. A curva de maior declive corresponde, portanto, à de 9,0 J, seguida pelas de 3,0 J e 1,5 J. Adicionalmente, neste gráfico observa-se a máxima percentagem acumulada de ligações quebradas até o final do evento de quebra em cada energia de impacto (instante de tempo 0,0014 s), sendo

maior para 9,0 J, seguido de 1,5 J e finalmente 3,0 J. Este padrão indica que provavelmente a distribuição de fragmentos será mais grossa no caso da partícula impactada com 3,0 J. Efetivamente, a “função quebra” resultante em cada evento de quebra mostra uma distribuição de tamanhos mais grossa no impacto em 3,0 J (Figura 5.10 - direita). Cabe ressaltar que estas últimas não representam uma função quebra estatisticamente válida, devido à falta de réplicas. Assim, a apresentação destes resultados apenas pretende mostrar o fenômeno nesse evento simples de quebra, indicando assim a correlação entre as duas medidas (razão de dano e função quebra num evento simples).

Observando o declive inicial da curva de razão de dano para a energia de 3,0 J, esperava-se um maior número de ligações quebradas para o último tempo de simulação nesta energia (Figura 5.10 - esquerda) em relação ao obtido. A origem deste resultado foi qualitativamente analisada observando que, neste experimento virtual (evento de quebra), os fragmentos da quebra primária foram expulsos rapidamente fora da região de impacto da bola, impedindo processos subsequentes de quebra, também chamada de quebra secundária (SAEIDI et al., 2016). Nos experimentos usando os impactos com as outras energias (9,0 e 1,5 J) os fragmentos da quebra primária foram quebrados subsequentemente, mostrando distribuições de tamanhos mais finas (Figura 5.10 - direita)

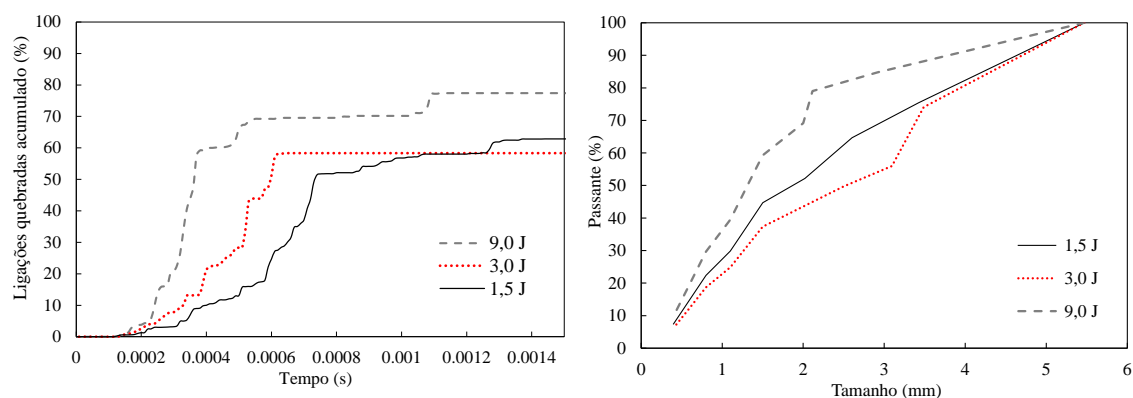


Figura 5.10. Impacto simples de uma partícula individual em três energias de diferentes magnitudes. Razão de dano resultante (esquerda). Função quebra resultante num evento simples de quebra (direita).

5.2.1.4 Efeito do tamanho da partícula individual

O efeito do tamanho de partícula sobre a sua fratura foi testado em partículas de dois tamanhos diferentes, modeladas usando os mesmos parâmetros e a mesma distribuição de esferas, mas escalonada em dois tamanhos: 7,73 e 5,47 mm. A resistência dos aglomerados nos dois tamanhos foi medida por meio de ensaios de compressão uniaxial. Os resultados mostraram que usando o mesmo conjunto de parâmetros para cada caso, a metapartícula de 7,73 mm apresenta maior resistência em comparação com a de 5,47 mm, tal como se ilustra no seu perfil esforço-deformação (Figura 5.11). As descobertas indicam que o incremento da escala de tamanho da distribuição de esferas resulta em aumento da resistência do aglomerado.

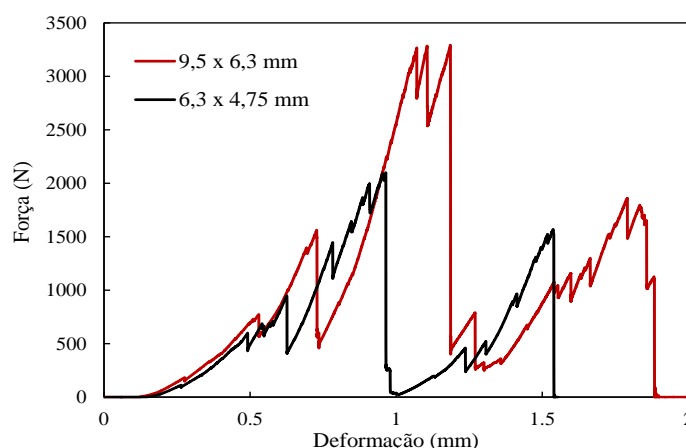


Figura 5.11. Perfil esforço-deformação para metapartículas em duas escalas de tamanho diferentes, usando os mesmos parâmetros.

5.2.1.5 Quebra de leitos de partículas

Os resultados dos ensaios virtuais de quebra de leitos de partículas são divididos conforme as propriedades caracterizadas por BARRIOS (2010), as quais são: Captura de partículas, massa quebrada e fragmentação. As variáveis avaliadas foram: intensidade de energia aplicada, configuração do arranjo, e tamanho da bola de impacto.

Na Figura 5.12 apresenta-se a sequência de um experimento virtual de impacto com bola sobre um leito de partículas de cinco camadas.

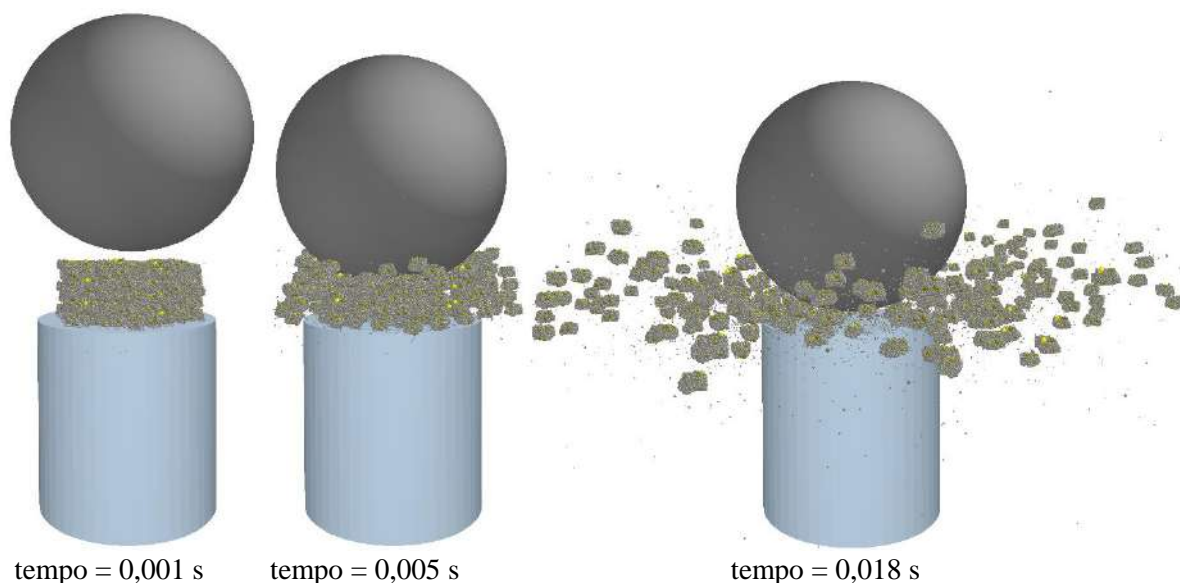
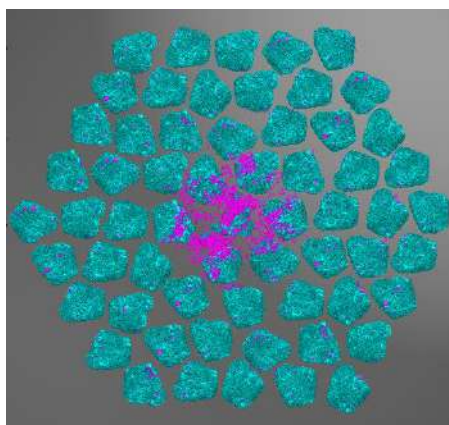


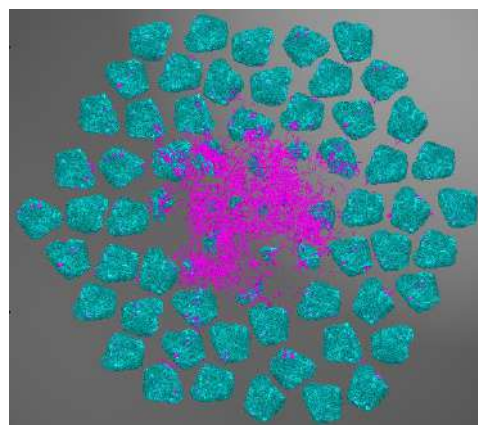
Figura 5.12. Sequência de impacto sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo BPM – Software EDEM).

5.2.1.5.1 *Raio de captura*

Os resultados mostraram a capacidade do modelo de reproduzir o aumento do raio de captura com o aumento da energia aplicada, tal como se ilustra qualitativamente na Figura 5.13. Nesta é apresentada, por contraste de cores, a região de esforço da bola sobre o leito, resultando numa dada percentagem de ligações quebradas, sendo qualitativamente maior na energia de 9,0 J (Figura 5.13 – direita). Vale ressaltar que cada imagem corresponde ao instante de tempo em que a bola conseguiu capturar e esforçar radialmente o maior número de partículas, sendo isto fisicamente correspondente à impressão que um conjunto de partículas pode deixar sobre um papel carbono depois de um esforço normal aplicado sobre elas. Este critério foi usado experimentalmente por BARRIOS *et al.* (2011) para a determinação do raio de captura de um leito de partículas, sendo do mesmo modo a base do modelo de captura desenvolvido no presente estudo.



Impacto 1,5 Joules



Impacto 9,0 Joules

Figura 5.13. Ilustração do incremento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis (Modelo BPM - software EDEM).

Quantitativamente foi determinado o raio de captura das partículas para as diferentes energias de impacto em dois casos: partículas com energia média de fratura - E_{m50} de 0,42 e 0,15 J. Na Figura 5.14 é apresentada quantitativamente a tendência a aumentar o raio de captura com o aumento da energia aplicada nos dois casos. Os resultados mostram, adicionalmente, o efeito da resistência média da partícula sobre o raio de captura, sendo maior o raio de captura quando as partículas apresentam resistência ou energia média de fratura mais baixa. Essas observações dos ensaios virtuais se encontram em concordância com o fenômeno físico, seguindo o comportamento encontrado experimentalmente por BARRIOS *et al.* (2011).

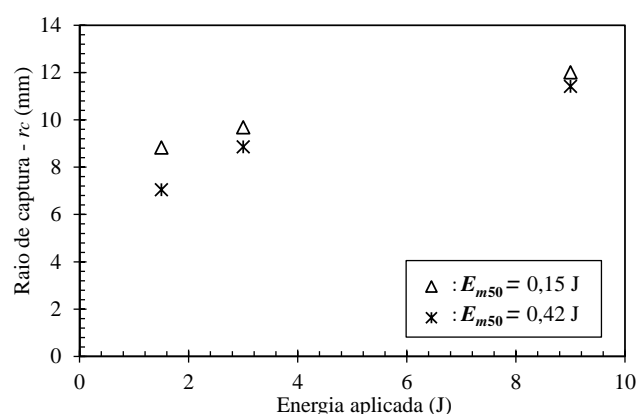


Figura 5.14. Raio de captura de partículas com duas resistências médias de fratura, dispostas em monocamada (três anéis de partículas). Impacto em três energias usando bola de aço de 88 mm de diâmetro (Modelo BPM).

O raio de captura foi determinado quantitativamente medindo a distância desde o centro da bola até os pontos de esforço compressivo nas partículas dispostas radialmente, tal como é ilustrado na Figura 5.15. Nesta é observada a distância máxima de esforço radial atingida por uma bola de 88 mm com energia de 1,5 J sobre um leito de partículas em monocamada (3 anéis). As descobertas se encontram em concordância com o comportamento encontrado experimentalmente por BARRIOS *et al.* (2011).

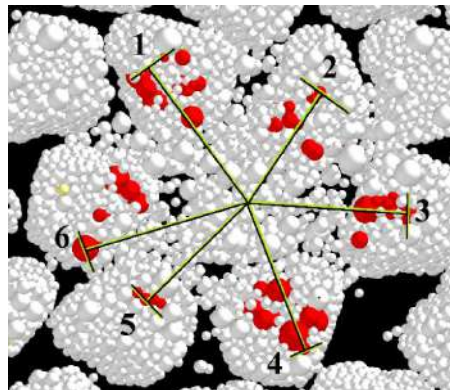


Figura 5.15. Pontos de esforço compressivo de partículas com resistência média de fratura de 0,42 J, dispostas em monocamada (3 anéis). Impacto com energia de 1,5 J usando uma bola de 88 mm de diâmetro. Máxima captura atingida pela bola. (BPM).

O efeito do tamanho do impactor (bola de aço) foi estudado virtualmente usando bolas de 88 e 40 mm de diâmetro. Os resultados mostraram a sensibilidade do modelo para impactos com diferentes tamanhos de bola, sendo a captura de partículas maior com o tamanho da bola maior (Figura 5.16). Nesta figura observa-se a variação da captura de partículas em um leito de monocamada com três anéis, para impactos com três energias usando dois tamanhos de bola.

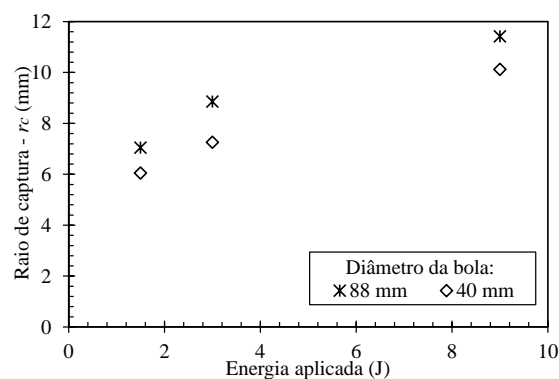


Figura 5.16. Captura de partículas com energia média de fratura de 0,42 J dispostas em monocamadas (três anéis de partículas), usando bolas de 40 e 88 mm de diâmetro (BPM).

A penetração de uma bola de impacto em um leito indiretamente mostra a área (superfície de revolução) de captura de partículas, sendo a captura maior quando a bola penetra mais no leito. A capacidade de um leito para restringir o avanço de uma bola que o impacta mostra a sensibilidade do modelo para reproduzir a captura em leitos de diferentes camadas.

Um modelo que poderia ser aplicado para determinar a área de captura das partículas em leitos de múltiplas camadas, baseado na área superficial da calota esférica (Equação 5.1) e no modelo de captura de BARRIOS *et al.* (2011) é apresentado na Equação 5.2. Já um modelo mais robusto ao proposto (Equação 5.2) deveria considerar algumas outras propriedades, tais como as de contato entre a bola e as partículas (atrito, restituição).

$$A_c = 2\pi \cdot \frac{d_b}{2} \cdot \Delta' \quad \text{Eq. 5.1}$$

Substituindo a equação 2.12 na equação 5.1:

$$A_c = 2\pi \cdot \frac{d_b}{2} \cdot h \cdot a_c \cdot \left[1 - \exp \left(-b_c \cdot \left(\frac{E}{E_{50}} \right)^{c_c} \right) \right] \quad \text{Eq. 5.2}$$

O modelo BPM conseguiu reproduzir a restrição do avanço da bola dentro de leitos de múltiplas camadas, encontrando-se diferenças na penetração máxima da bola em leitos de diferentes camadas (Figura 5.17).

Na Figura 5.17 apresenta-se o avanço de penetração máxima de uma bola em dois testes de impacto, usando uma energia de 1,5 Joules sobre um leito de 3 camadas (Figura 5.17 - direita) e 5 camadas (Figura 5.17 - esquerda). A partir da penetração da bola no leito e da Equação 5.1 foi determinada a área de captura em cada caso, sendo 1950 mm² e 856 mm² nos arranjos de 5 e 3 camadas, respectivamente.

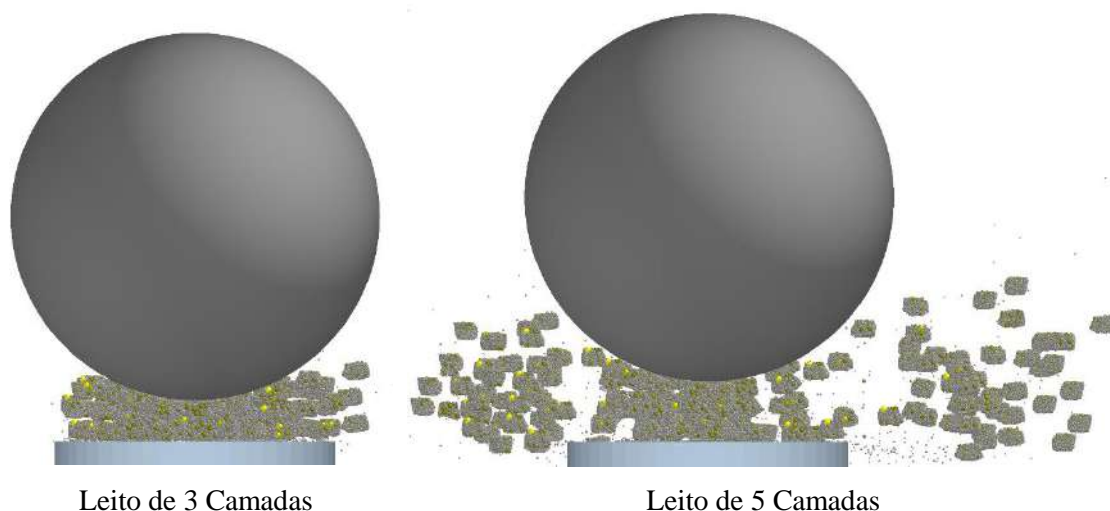


Figura 5.17. Penetração máxima atingida por bola de 88 mm de diâmetro em leitos de partículas de diferentes camadas. A energia de impacto usada foi 1,5 Joules sobre partículas virtuais com resistência média de fratura de 0,42 J (Modelo BPM - Software EDEM).

5.2.1.5.2 *Massa quebrada*

O raio de captura é uma medida que considera geometricamente as partículas de um arranjo envolvidas num evento de impacto, independente da fratura destas. Assim, a energia aplicada nas partículas pode ser consumida em fragmentação, dano ou dissipada em outras formas. Por outro lado, a massa quebrada quantifica a energia realmente aproveitada na quebra de partículas, sem considerar o seu grau de fragmentação.

A massa quebrada no modelo BPM foi avaliada em leitos de partículas de diferentes configurações usando três energias de impacto. Os resultados dos ensaios virtuais mostraram a capacidade do modelo de reproduzir o incremento da massa quebrada com o aumento da energia aplicada, tal como se observa qualitativamente na Figura 5.13, na qual é apresentado o impacto de uma monocamada em duas energias diferentes (1,5 e 9,0 J). Nesta figura se ilustra, por contraste de cores, a região esforçada no leito pela bola, sendo em 9,0 J e 1,5 J atingida a fratura de 9 e 5 metapartículas, respectivamente. Na Figura 5.18 apresenta-se a massa quebrada de partículas em diferentes configurações, usando três energias de impacto com bola de 88 mm de diâmetro. Nesta, observa-se quantitativamente o efeito do incremento da energia de impacto, sendo responsável pelo aumento da massa quebrada em todos os casos avaliados. Adicionalmente, nessa figura observa-se o efeito do aumento no número de partículas (anéis e camadas) sobre a massa quebrada, apresentando-se de forma geral um

aumento da massa quebrada com o aumento do número de anéis de partículas, sendo, por outro lado, o aumento do número de camadas no leito responsável pela diminuição da massa quebrada. Resultados com tendências similares foram obtidos experimentalmente por BARRIOS (2010) e computacionalmente por POTAPOV e CAMPBELL (2000) usando o modelo de quebra *DGB* em 2D.

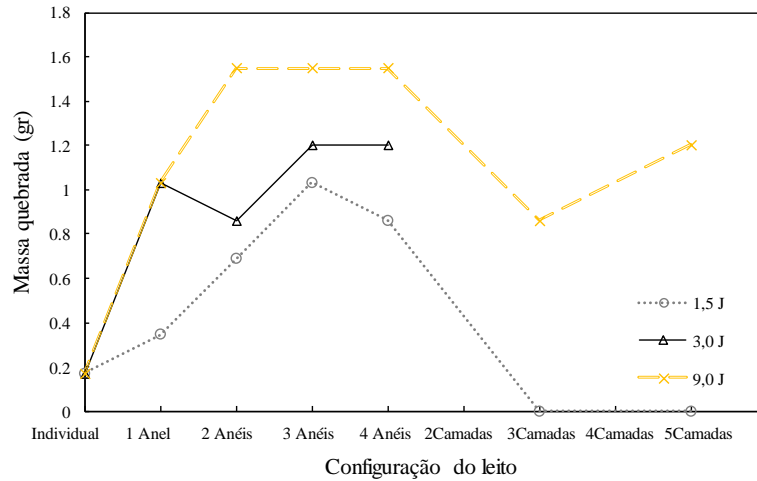


Figura 5.18. Comparação da massa quebrada em diferentes configurações de arranjos de partículas. Curvas simuladas para em diferentes energias de impacto usando impactor esférico de 88 mm de diâmetro (BPM).

O BPM conseguiu representar o efeito da resistência (energia média de fratura) das partículas sobre a massa quebrada, sendo esta última maior, quando menor a resistência das partículas na configuração de 1 e 2 anéis, e igual para 3 e 4 anéis (Figura 5.19).

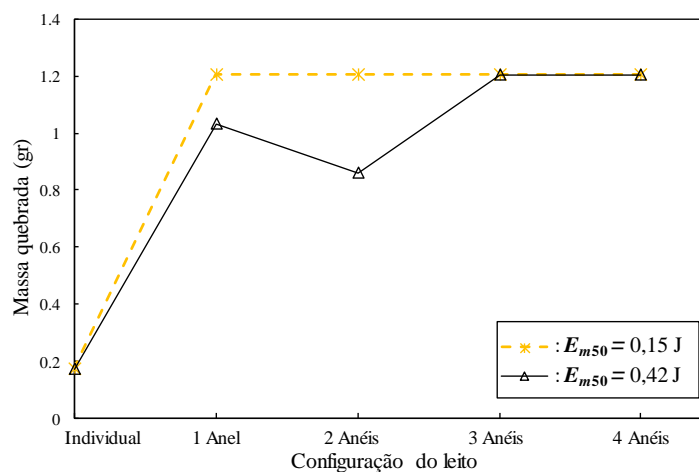


Figura 5.19. Efeito da resistência das partículas sobre a massa quebrada em impactos de 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro (BPM).

O efeito do tamanho da bola foi estudado usando dois tamanhos (88 e 40 mm). Os resultados mostraram que a massa quebrada é maior para a bola de maior diâmetro nas duas energias avaliadas (Figura 5.20). Esses resultados mostram que a maior área de contato da bola de 88 mm distribuiu mais amplamente a energia no leito, quebrando um maior número de partículas. Vale ressaltar que esta medida considera a energia usada na fratura efetiva das partículas, contudo, desconsidera o grau de fragmentação atingido em cada caso, o qual se esperaria fosse maior com a bola de 40 mm de diâmetro, já que energia é aplicada de forma mais intensa sobre uma menor área.

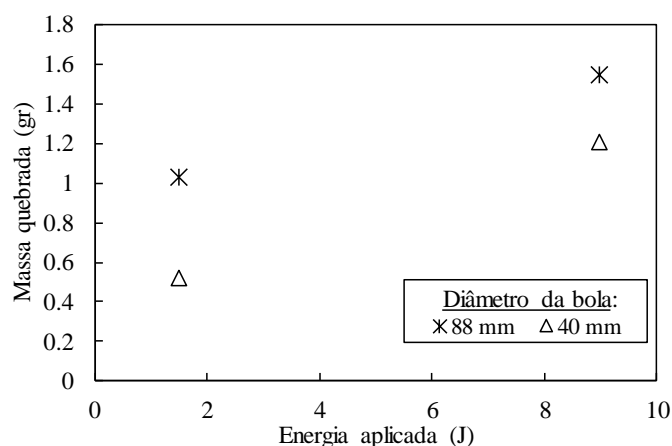


Figura 5.20. Efeito do tamanho da bola de impacto sobre a massa quebrada em leito em monocamada com três anéis de partículas (BPM).

5.2.1.5.3 Fragmentação de leitos de partículas

A massa quebrada é uma medida que considera unicamente o número de partículas fraturadas num evento de quebra sem incluir o grau de fragmentação destas. Assim, um complemento para avaliar a distribuição de energia é a distribuição de tamanhos do produto e a função quebra.

Experimentalmente é bem conhecido que o aumento da energia de esforço sobre as partículas gera distribuições de tamanhos mais finas. A reprodução virtual deste fenômeno é um aspecto fundamental que todo modelo de quebra de partículas deveria considerar.

O modelo BPM mostrou a capacidade de reproduzir o efeito de aumento na intensidade da fragmentação com o aumento da energia aplicada, tal como se apresenta na Figura 5.21. Nesta figura, adicionalmente observa-se que as distribuições mais grossas correspondem a aquelas configurações com maior quantidade de partículas. A curva construída considera no cálculo as partículas que não foram fraturadas no evento de quebra. Assim, os arranjos que apresentam maior número de partículas inerentemente terão distribuições de tamanhos mais grossas.

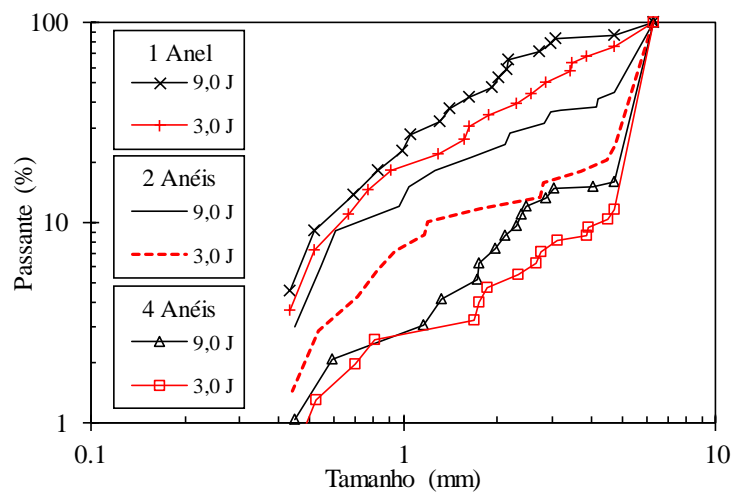


Figura 5.21. Distribuição granulométrica dos produtos dos impactos com bola de 88 mm sobre arranjos de partículas em diferentes configurações (BPM).

Foi estudada a influência do tamanho da bola (diâmetros de 80 e 40 mm) sobre a fragmentação do leito de partículas. Os resultados mostraram maior fragmentação para maiores intensidades de energia aplicada, sendo apresentadas distribuições de tamanhos mais finas com a bola de 88 mm (Figura 5.22).

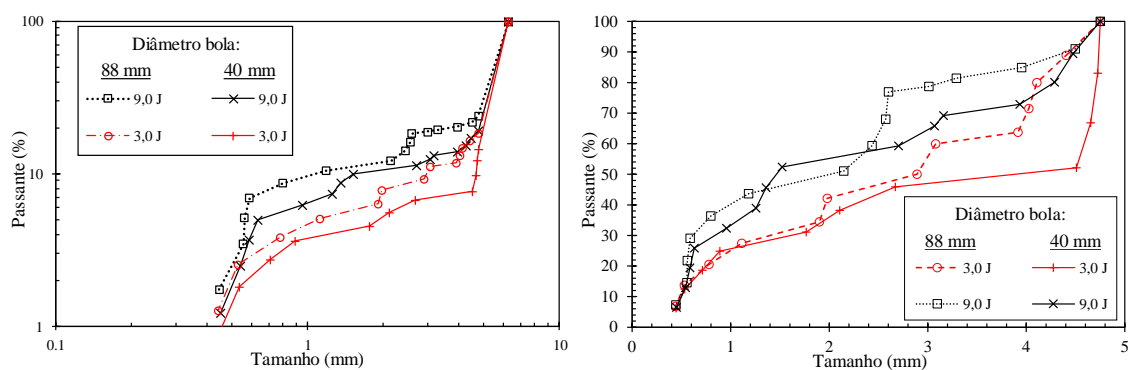


Figura 5.22. Fragmentação em eventos de impacto usando bolas de diâmetros diferentes com duas energias aplicadas: distribuição de tamanhos do produto (esquerda); função quebra (direita) (BPM).

Considerando que o número de partículas quebradas (massa quebrada) foi maior com a bola de 88 mm em comparação com a bola de 40 mm para uma mesma intensidade de energia, a partir da simulação pode-se concluir que a bola de 88 mm distribui a energia num maior número de partículas, em decorrência de seu maior alcance no leito. Por outro lado, com a bola de 40 mm é possível que a energia tenha sido aplicada pontualmente sobre um reduzido número de partículas, assim, seria esperado que a intensidade de fragmentação sobre estas partículas tenha sido maior. No entanto, a comparação realizada por meio da função quebra (ou seja, descontando a proporção de partículas que continuaram na faixa original de tamanhos) nestes dois casos não mostrou diferenças relevantes nesse aspecto (Figura 5.22 - direita). Cabe ressaltar que o número de partículas quebradas difere em cada caso, sendo, por exemplo, na energia de 9,0 Joules igual a 9 e 7 partículas quebradas com a bola de 88 e 40 mm, respectivamente, e com a energia de 3,0 J, igual a 7 e 6 partículas quebradas com a bola de 88 e 40 mm, respectivamente.

Há ainda uma quantidade de energia que não foi aproveitada na fragmentação das partículas, a qual resulta no enfraquecimento destas. O BPM considera este enfraquecimento por meio do número de ligações quebradas, as quais podem não ser as suficientes para conduzir à fratura das metapartículas. Na Figura 5.23 é apresentada a razão de dano (ligações quebradas - tempo) correspondente a eventos de impacto simples sobre um arranjo de partículas de três anéis, usando bolas de diferente diâmetro. A partir da inclinação das curvas observa-se que a taxa de aumento da proporção quebrada correspondente a bolas de 40 mm de diâmetro é maior em comparação com aquela da

bola de 88 mm para todas as energias de impacto avaliadas, já que a bola de 40 mm apresenta maior velocidade no impacto. Por outro lado, a percentagem acumulada total de ligações quebradas no final do evento é maior com a bola de 88 mm, exceto na energia de 1,5 Joules, em que a percentagem é igual nas duas bolas.

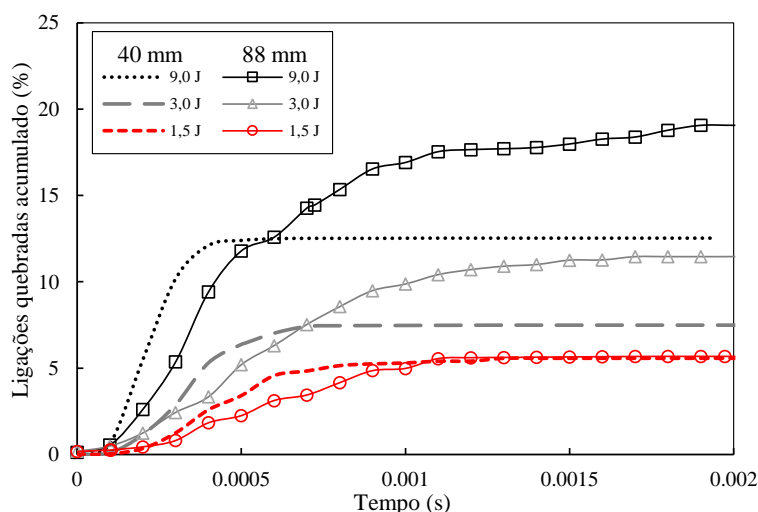


Figura 5.23. Razão de dano no impacto de um arranjo de partículas com três anéis usando bolas de 40 e 88 mm de diâmetro em três energias de diferentes magnitudes (BPM).

Além de estar associado aos benefícios geométricos que aparentemente se apresentam como a bola de 88 mm (com a qual se consegue capturar e quebrar mais partículas), o comportamento observado na Figura 5.23, também indica que o caráter não confinado do experimento promove a perda de energia na forma da cinética dos fragmentos. Qualitativamente isto é evidenciado como um espalhamento das metapartículas ou seus fragmentos de quebra primária, impedindo seu carregamento e quebra subsequente. Considerando a maior taxa de quebra inicial aplicada pela bola de 40 mm (maior inclinação nas curvas) se esperaria atingir um comportamento similar no total de ligações quebradas em 0,002 segundos (Figura 5.23) com cada bola. No entanto, os resultados mostraram menores ligações quebradas para esse caso, mostrando assim maior dissipação de energia quando é usada a bola de 40 mm. Por outro lado, a maior área superficial da bola de 88 mm possibilita a sua maior transmissão de energia ao leito.

O efeito da resistência média das partículas na sua fragmentação em impactos com bola foi medido e comparado para partículas de dois tipos: partículas com energia média

de fratura (E_{m50}) de 0,15 J e 0,42 J. (Figura 5.24). O modelo é sensível à mudança da resistência das partículas na sua fragmentação, mostrando que as partículas com menor resistência média à fratura apresentam uma função quebra mais fina em todas as configurações de leitos de partículas avaliadas comparativamente.

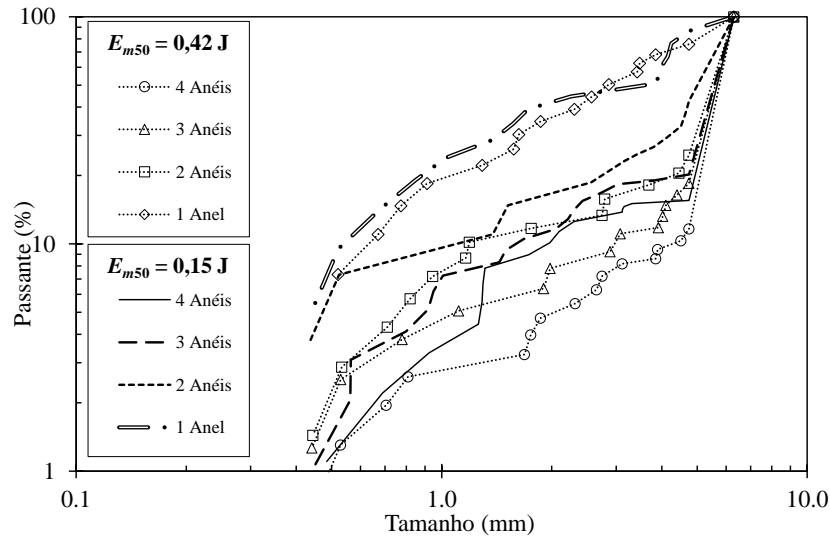


Figura 5.24. Comparação entre as funções quebra simulada resultante em impactos de leitos de partículas compostos por partículas com diferentes energias médias de fratura em cada caso (BPM).

5.2.2 Análise de sensibilidade do FBM

A análise de sensibilidade do FBM foi aplicada aos experimentos virtuais em leitos de partículas. Os resultados apresentados consideram a descrição do raio de captura, da massa quebra e da fragmentação de partículas em leitos. Considerando as propriedades descritas foi avaliada a intensidade de energia aplicada, a configuração do arranjo e o tamanho da bola. Os parâmetros usados nesta etapa são apresentados na Tabela 5.6.

Na Figura 5.25 apresenta-se a sequência de um experimento virtual de impacto com bola sobre um leito de partículas de cinco camadas.

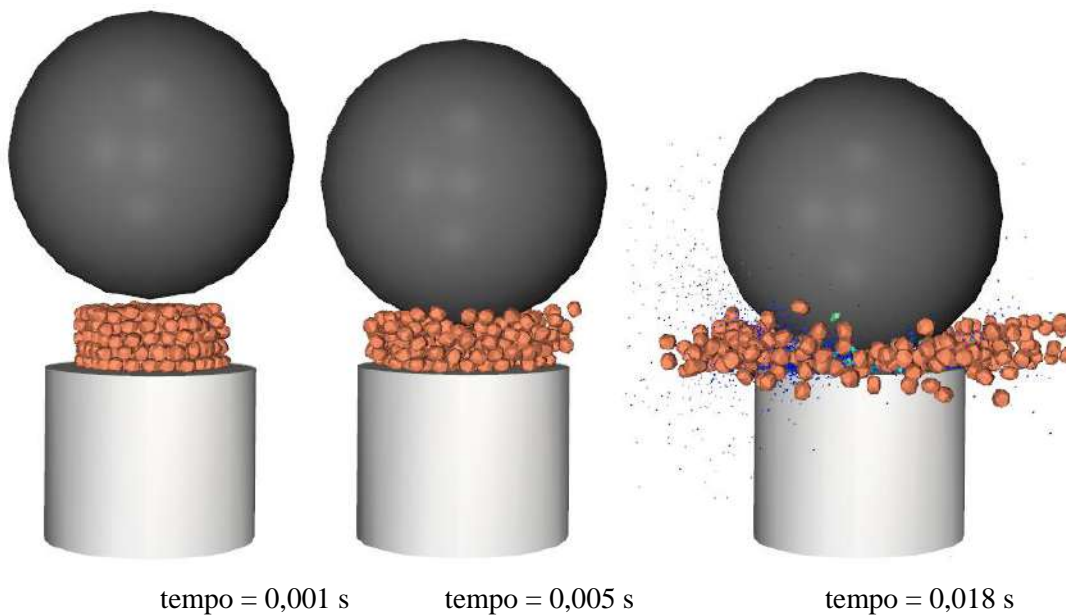


Figura 5.25. Sequência de impacto com bola sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo FBM - software Rocky).

5.2.2.1 Raio de Captura

Os resultados mostraram a capacidade do modelo para reproduzir o aumento do raio de captura com o aumento da energia aplicada, tal como se ilustra qualitativamente na Figura 5.26, na qual observa-se a região de captura geométrica que uma bola de 88 mm de diâmetro apresenta sobre um leito de partículas de quatro anéis. Na energia de impacto de 9,0 J (Figura 5.26 – direita) observa-se uma maior região de captura da bola em comparação àquela com a energia de 1,5 J (Figura 5.26 – esquerda). Nesta última figura observa-se que algumas das partículas capturadas pela bola não sofrem fratura, mostrando efeitos interessantes no modelo.

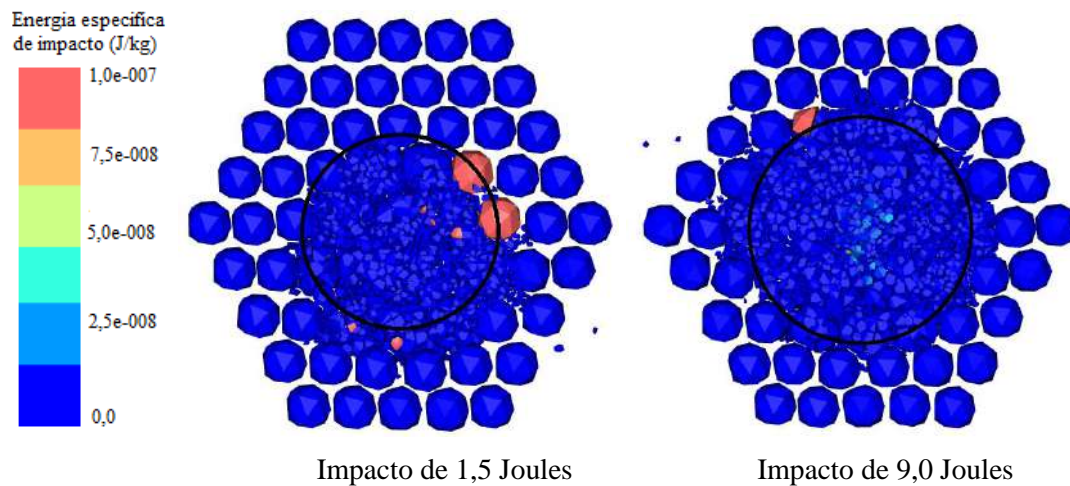


Figura 5.26. Ilustração do aumento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis, usando bola de 88 mm de diâmetro. Escala de cores correspondente com a região de esforço aplicada, resultando na quebra de algumas partículas (Modelo FBM – *software* ROCKY).

Na Figura 5.27 é apresentado o raio de captura para dois tamanhos de bola. Nesta figura, além de se apresentar o efeito do aumento da energia sobre a captura, é mostrado o efeito do tamanho da bola, sendo o raio de captura maior quando a bola apresenta maior diâmetro. Essas observações se encontram em concordância com o comportamento experimental encontrado por BARRIOS *et al.* (2011).

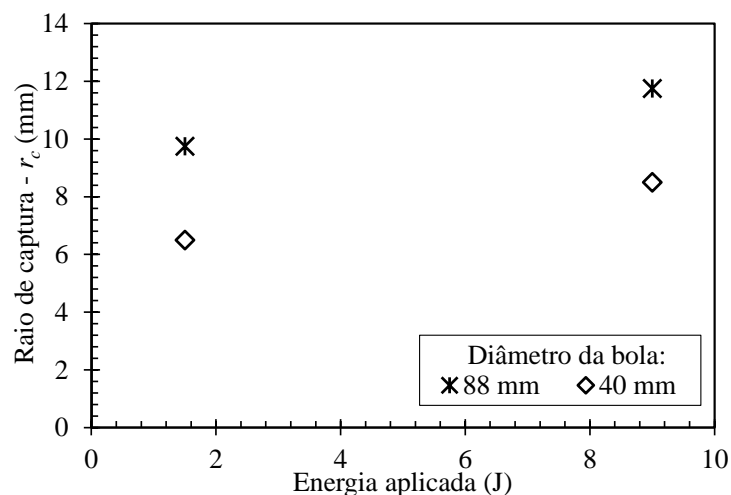


Figura 5.27. Captura de partículas dispostas em monocamadas com três anéis, usando bola de 88 e 40 mm de diâmetro (FBM).

Na Figura 5.28 ilustra-se a captura de partículas com base na penetração da bola em leitos de diferentes camadas. Nesta figura é observado que para uma energia de 3,0 J o avanço da bola dentro do leito não parece drasticamente restringido pelo aumento do número de camadas, chegando a uma penetração semelhante nos dois casos (3 e 5 camadas), sendo apenas ligeiramente maior quando se tem um menor número de camadas de partículas. Na Figura 5.28 ilustra-se o avanço vertical máximo atingido pela bola. Quanto maior seja o avanço, maior será a área de contato da bola com as partículas.

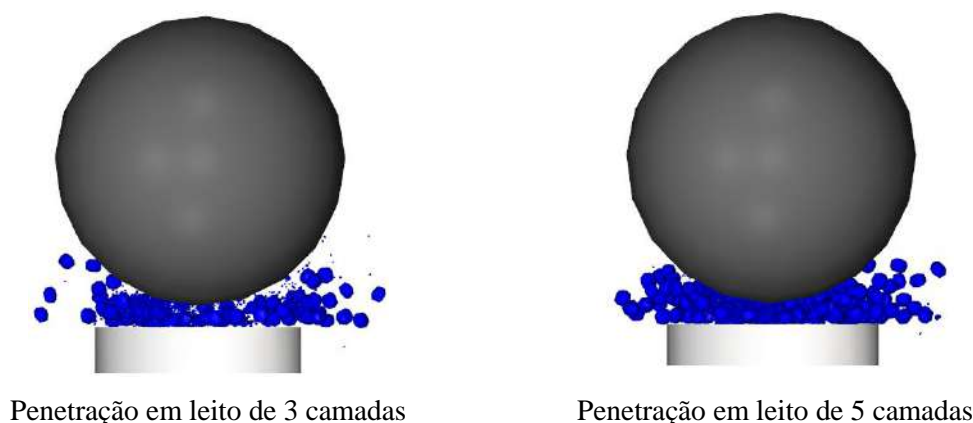


Figura 5.28. Ilustração da penetração máxima da bola em leitos de partículas de diferentes camadas, energia de impacto de 3,0 Joules (software Rocky).

5.2.2.2 Massa quebrada

A Figura 5.29, mostra que o modelo FBM conseguiu reproduzir o aumento da massa quebrada com o aumento da energia aplicada, onde é apresentado o impacto de um leito em monocamada com quatro anéis de partículas. Na figura, observa-se um maior número de partículas quebradas (massa quebrada) quando é aplicada mais energia. Esse comportamento é apresentado para diversas configurações de leitos de partículas na Figura 5.30, onde é observada uma diminuição da massa quebrada com o aumento do número de camadas de partículas para as energias de 1,5 e 3,0 J, e um aumento da massa quebrada com o aumento do número de camadas na energia de 9,0 J. O comportamento observado nesta energia parece indicar que existe uma energia crítica, acima da qual é favorável a condição de leitos em múltiplas camadas, podendo também ser explicado pelo efeito do aumento da velocidade de impacto. Infelizmente, não foram encontrados resultados experimentais que validem este efeito em altas energias.

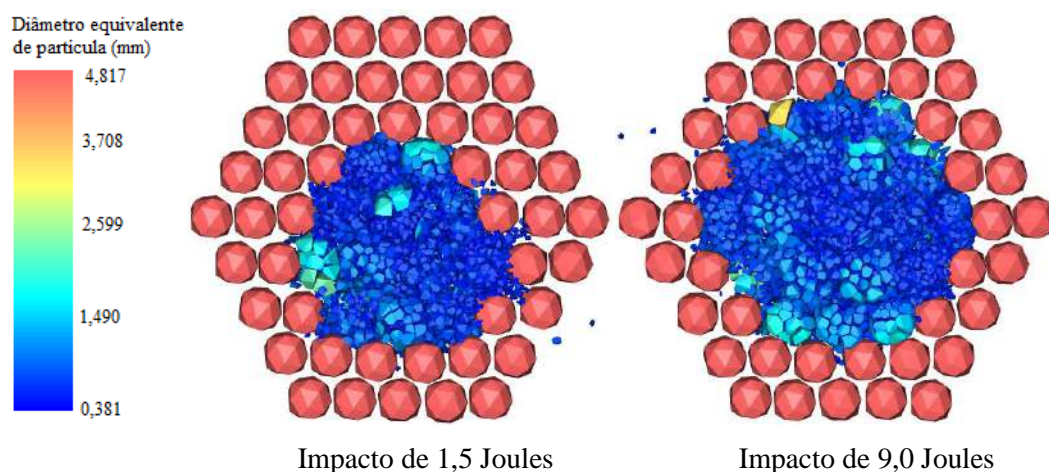


Figura 5.29. Ilustração do aumento da massa quebrada em um leito de partículas de quatro anéis devido ao impacto com uma bola de 88 mm de diâmetro com duas energias. Escala de cores correspondente ao tamanho de partícula final (FBM).

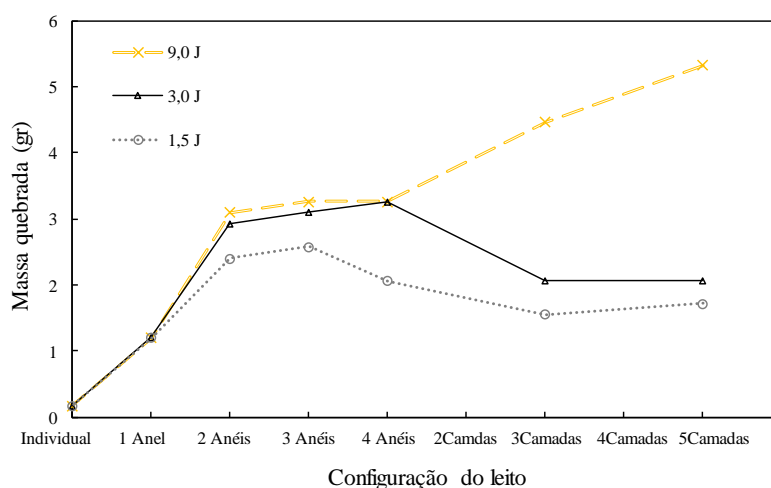


Figura 5.30. Massa quebrada em leitos de partículas de diferentes configurações usando impacto em três energias com bola de 88 mm de diâmetro (FBM).

O modelo FBM conseguiu reproduzir o efeito do tamanho da bola na massa quebrada, mostrando-se maior quando maior o diâmetro da bola usado nas duas energias avaliadas (Figura 5.31), tal como observado previamente com o modelo BPM.

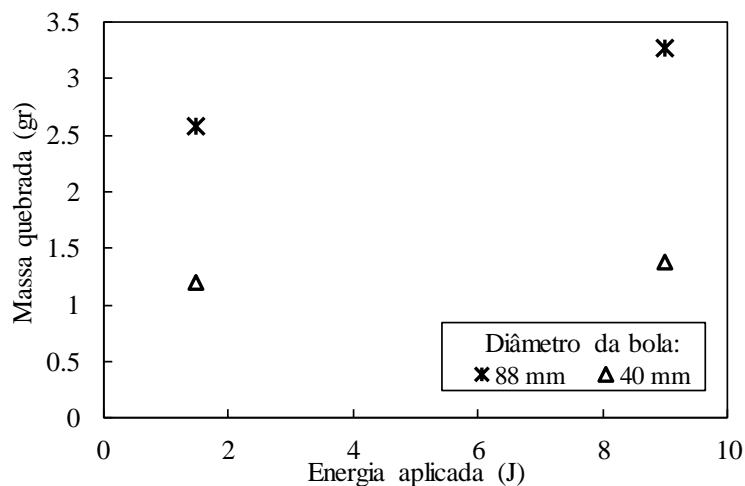


Figura 5.31. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 e 40 mm de diâmetro sobre um leito de 3 anéis de partículas (FBM).

5.2.2.3 Fragmentação de leitos de partículas

O modelo FBM mostrou sensibilidade ao aumento da intensidade de energia aplicada sobre um leito de partículas, resultando em distribuições de tamanhos mais finas (Figura 5.32). Nesta, apresenta-se a distribuição granulométrica da quebra de leitos de partículas em diferentes configurações. Adicionalmente, observa-se o efeito do número de partículas no leito, mostrando distribuições mais grossas em configurações de leitos que apresentam maior quantidade de partículas. Cabe ressaltar que esta medida considera também as partículas que não foram fraturadas no evento de quebra. Assim, as configurações que apresentam maior número de partículas apresentaram, inerentemente, uma curva de distribuição de tamanho de partícula mais grossa.

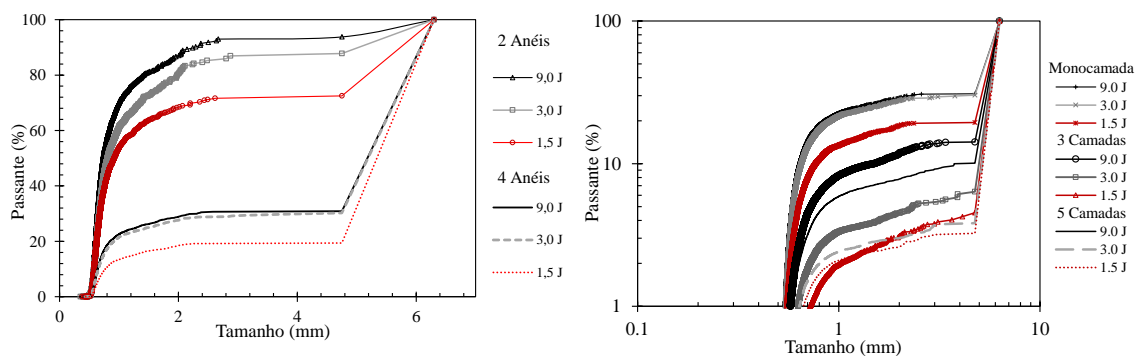


Figura 5.32. Distribuição do produto da quebra por impacto com bola de 88 mm para arranjos de partículas com diferentes configurações: arranjos com diferente número de anéis (esquerda); arranjos com diferente número de camadas (direita) (FBM).

Na análise dos experimentos virtuais usando bolas de diferentes diâmetros encontrou-se uma distribuição de tamanhos do produto mais fina com a bola de 88 mm nas duas energias avaliadas (Figura 5.33).

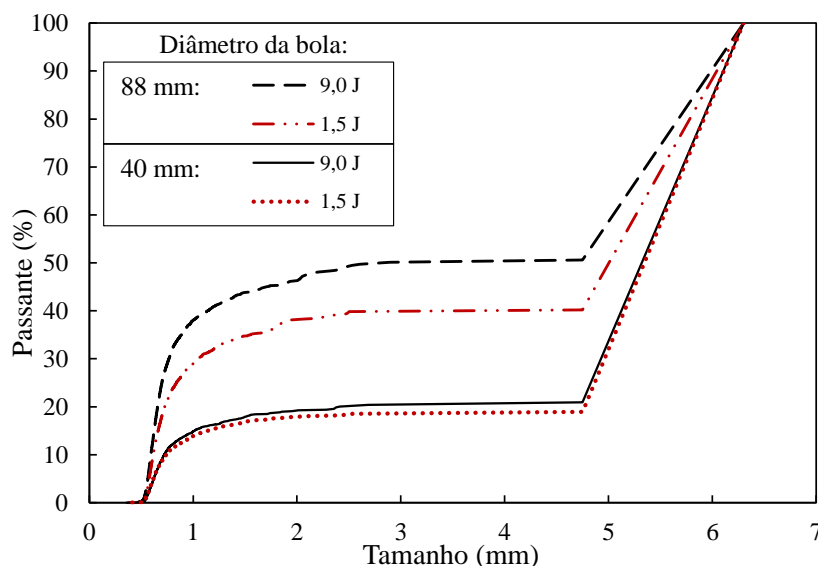


Figura 5.33. Distribuição de tamanhos do produto da quebra em eventos de impacto usando bolas de diferentes diâmetros sobre um leito de partículas de três anéis (FBM).

Considerando que o número de partículas quebradas (massa quebrada) foi maior com a bola de 88 mm em comparação com a bola de 40 mm na mesma intensidade de energia, pode-se inferir que a bola de 88 mm distribui a energia num maior número de partículas, enquanto a bola de 40 mm distribuiu-a sobre um número mais reduzido de partículas. Assim, a função quebra desta última deveria se caracterizar por ser mais fina. Entretanto, a comparação da função quebra para estes dois casos (bola de 88 e 40 mm) não mostrou diferenças relevantes, sendo este efeito reproduzido apenas parcialmente nos tamanhos finos para as duas energias avaliadas (Figura 5.34 – esquerda). Por outro lado, no intervalo entre 1,0 e 3,5 mm (Figura 5.34 - direita) não foi observada uma tendência inequívoca. A partir dessas observações não é possível, portanto, afirmar que efetivamente a bola de 40 mm gera maior intensidade de fragmentação sobre um grupo menos numeroso de partículas. Entretanto, é importante considerar que o número de partículas quebradas com a bola de 88 mm foi maior que com a bola de 40 mm.

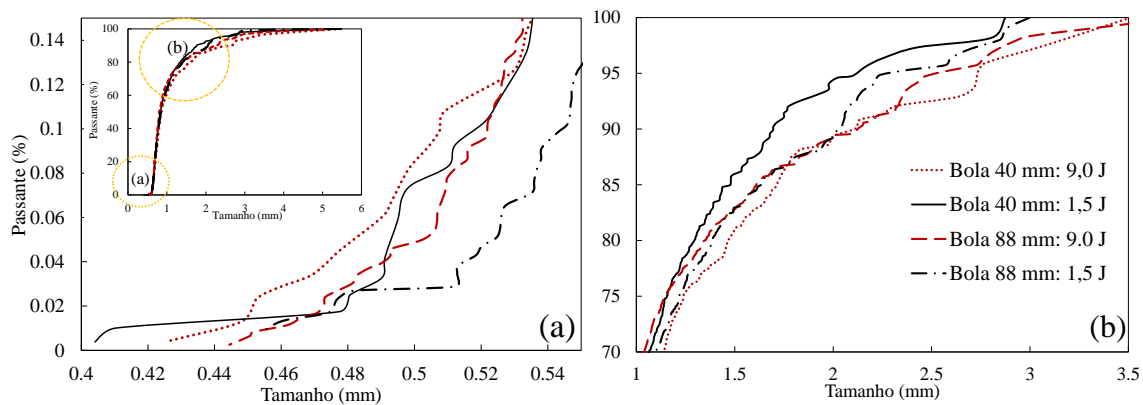


Figura 5.34. Função quebra em eventos de impacto com duas energias usando bolas de diferente diâmetro sobre leitos em monocamada de três anéis de partículas (FBM).

5.2.3 Análise de sensibilidade do PRM

A análise de sensibilidade do modelo PRM foi aplicada aos experimentos virtuais em leitos de partículas. Os resultados apresentados consideram a descrição do raio de captura, a massa quebrada e a fragmentação do leito de partículas. As variáveis avaliadas foram a intensidade da energia aplicada, o arranjo de partículas do leito e o diâmetro da bola. Os parâmetros usados nesta etapa são apresentados na Tabela 5.7 e 5.8.

Na Figura 5.35 é apresentada a sequência de um experimento virtual de impacto com bola sobre um leito de partículas de cinco camadas.

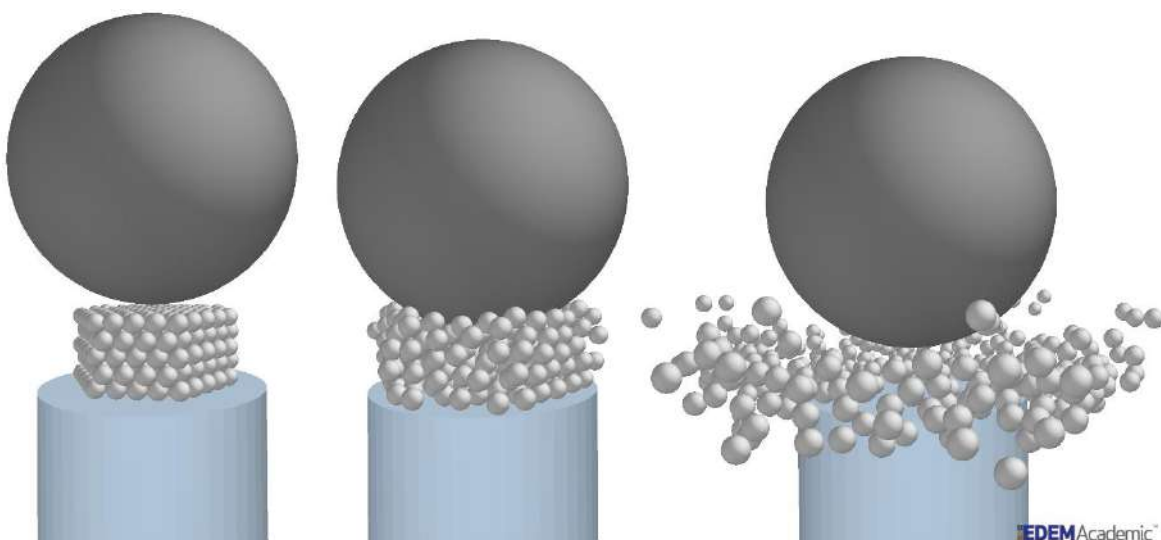


Figura 5.35. Sequência de impacto sobre leito de partículas de cinco camadas (Modelo PRM – software EDEM).

5.2.3.1 Raio de Captura

O modelo mostrou a capacidade de reproduzir o aumento do raio de captura com o aumento da energia aplicada, tal como é ilustrado qualitativamente na Figura 5.36, na qual se apresenta a região de captura geométrica da bola, sendo que o raio de captura aumenta com a energia aplicada.

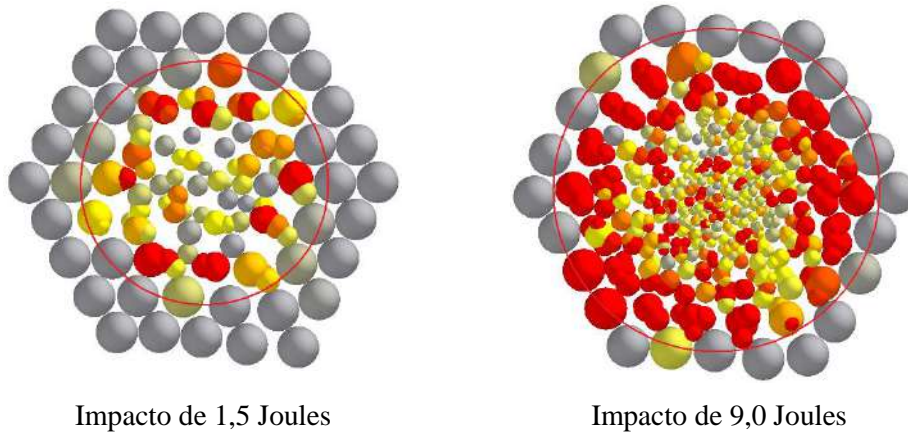


Figura 5.36. Ilustração do incremento do raio de captura com o aumento da energia aplicada sobre leito em monocamada de quatro anéis (Modelo PRM – software EDM).

Na Figura 5.37 apresenta-se quantitativamente o raio de captura em diferentes energias aplicadas para partículas com diferentes energias média de fratura – E_{m50} . Os resultados mostram a sensibilidade do modelo, apresentando-se um maior raio de captura em leitos que apresentam partículas com menor energia média de fratura.

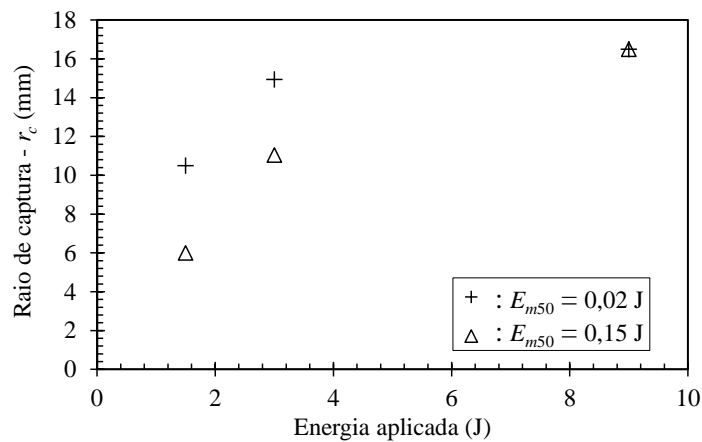


Figura 5.37. Raio de captura de partículas com duas resistências médias dispostas em monocamada (três anéis de partículas). Impacto em três energias usando bola de 88 mm de diâmetro (PRM).

O PRM é sensível à mudança do tamanho da bola de impacto, sendo maior a captura de partículas em um leito quando maior é o diâmetro da bola (Figura 5.38). No intervalo de energia de impacto avaliado com a bola de 40 mm o modelo não mostrou sensibilidade no raio de captura, sendo constante nas três energias avaliadas. No entanto, as pequenas diferenças observadas na penetração da bola de 88 mm mostram uma tendência para esse caso, sendo esta maior quanto maior é a energia aplicada.

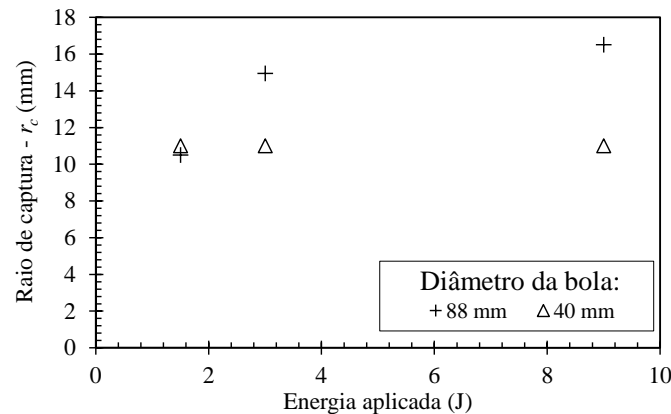


Figura 5.38. Raio de captura de partículas com energia média de fratura de 0,02 J dispostas em monocamada (três anéis de partículas), usando bolas de diferentes diâmetros (PRM).

O modelo mostrou sensibilidade na restrição do avanço da penetração da bola no leito, resultando em diferenças na área de captura em leitos de diferentes camadas impactadas com energia da mesma magnitude (Figura 5.39). As áreas de captura resultantes foram de 3114 mm² e 2257 mm² no leito de 5 e 3 camadas, respectivamente.

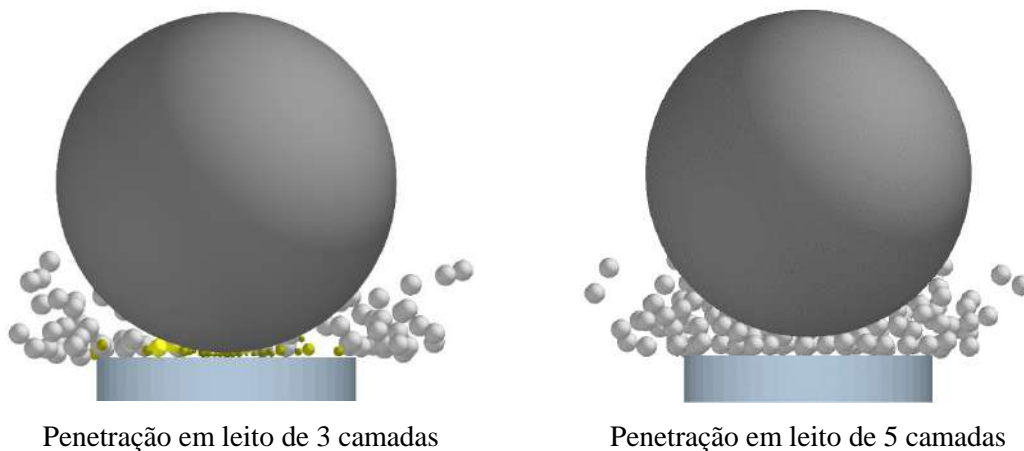


Figura 5.39. Penetração máxima de bola de 88 mm de diâmetro em leitos de partículas de diferentes camadas. A energia de impacto usada foi 1,5 Joules (Modelo PRM - software EDEM).

As limitações dos modelos de quebra instantânea, tais como o PRM e o FBM para descrever efetivamente a captura de partículas residem na alta despressurização que sofre o impactor imediatamente depois que as partículas são quebradas. O percurso de um impacto de uma bola sobre um leito de partículas apresenta diferentes estágios: oposição da bola pelas partículas superiores do arranjo até o instante imediatamente prévio a fratura, momento no qual gera-se a substituição das partículas e no qual a bola se despressuriza ficando sem oposição até o momento no qual são atingidos os fragmentos da quebra primária para a sua quebra subsequente. Cabe ressaltar que esta despressurização também acontece no fenômeno real, no entanto, em proporções muito inferiores.

5.2.3.2 Massa quebrada

O modelo PRM conseguiu reproduzir o aumento da massa quebrada com o aumento da energia aplicada. Isto é apresentado qualitativamente na Figura 5.40, na qual observa-se o impacto de um leito em monocamada com quatro anéis de partículas. Nesta é evidente o maior número de partículas quebradas quando é aplicada mais energia. Esse comportamento é evidenciado para diversas configurações de leitos de partículas na Figura 5.41, na qual se observa um aumento da massa quebrada com o incremento do número de anéis no leito, e uma posterior diminuição quando é aumentado o número de camadas no leito. O comportamento geral da curva encontra-se em concordância com os resultados obtidos por BARRIOS (2010).

Adicionalmente, na Figura 5.41 observa-se uma leve mudança na massa quebrada em 9,0 J no arranjo de 5 camadas, na qual a massa quebrada não diminui. Um comportamento similar foi observado também nos resultados do modelo FBM na mesma energia quando era aumentado o número de camadas do arranjo, o qual pode estar relacionado com uma energia limite que deveria ser aplicada para que a massa quebrada seja acrescentada quando o número de camadas no arranjo é maior.

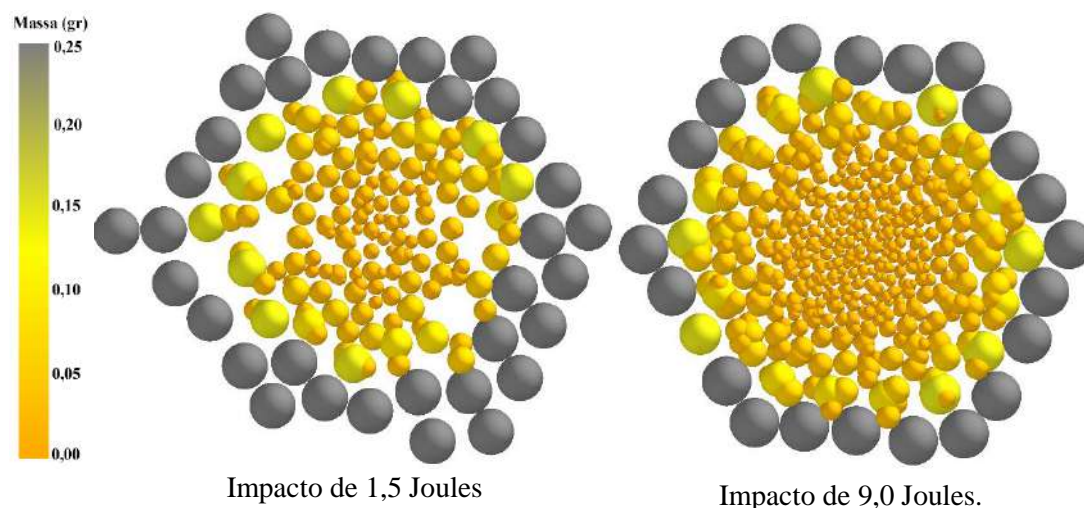


Figura 5.40. Ilustração da massa quebrada com o incremento da energia aplicada sobre leito em monocamada (Modelo PRM - software EDEM). As diferentes cores ilustram o tamanho das esferas.

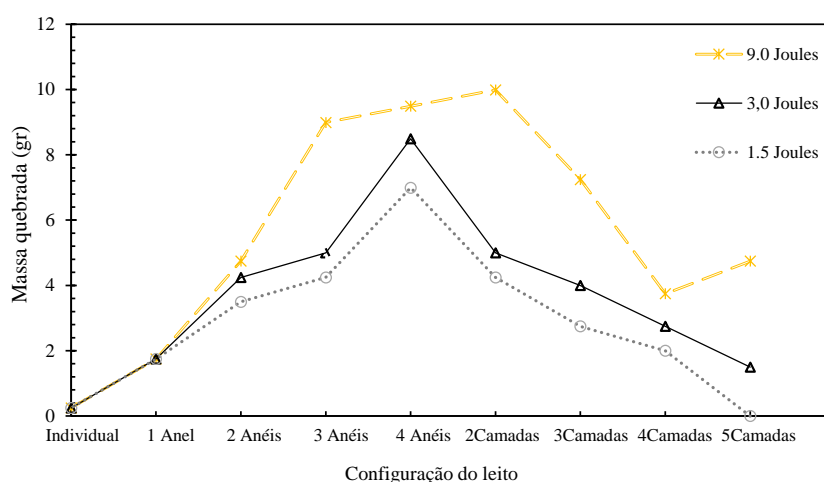


Figura 5.41. Massa quebrada em arranjos de partículas de diferentes configurações usando impactos de três energias com bola de 88 mm de diâmetro (PRM).

O modelo PRM conseguiu reproduzir o efeito do tamanho da bola na massa quebrada, mostrando-se maior quando maior o diâmetro da bola usado nas duas energias avaliadas (Figura 5.42). Nesta, observa-se que o modelo não mostrou muita sensibilidade nos experimentos usando a bola de 40 mm, na qual a massa quebrada para as diferentes energias aplicadas manteve-se constante. Do mesmo modo, o modelo mostrou-se sensível às mudanças da resistência à fratura das partículas do leito, sendo maior a massa quebrada quanto menor era a energia média de fratura das partículas (Figura 5.43)

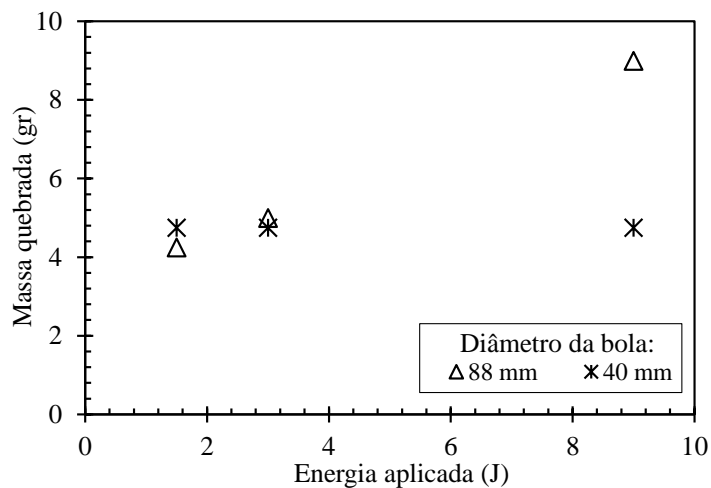


Figura 5.42. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 e 40 mm de diâmetros sobre leito em monocamada de três anéis de partículas (PRM).

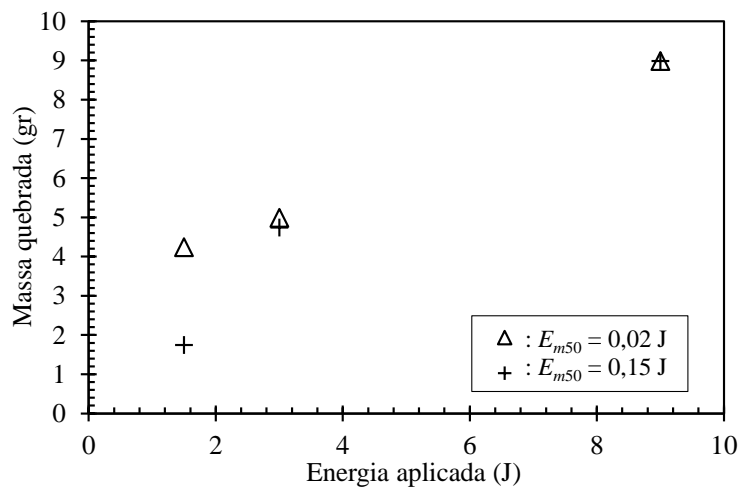


Figura 5.43. Massa quebrada em simulações usando bolas de 88 mm sobre um leito em monocamada com três anéis de partículas. Casos usando partículas com energia média de fratura diferente (PRM).

5.2.3.3 Fragmentação do leito de partículas

O modelo PRM mostrou a capacidade de reproduzir o efeito de aumento da fragmentação com o aumento da energia aplicada (Figura 5.44). Nesta, adicionalmente são observadas as distribuições mais grossas em aquelas configurações com maior quantidade de partículas.

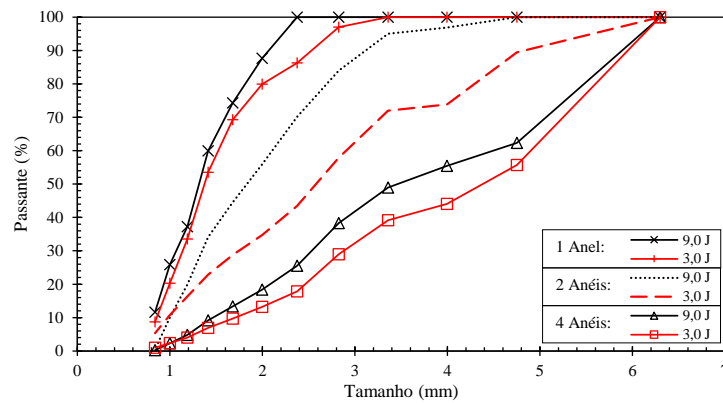


Figura 5.44 Distribuição granulométrica resultante em eventos de impacto com bola de 88 mm de diâmetro sobre arranjos de partículas de diferentes configurações (PRM).

O efeito do tamanho da bola na fragmentação foi reproduzido pelo modelo PRM, encontrando-se diferenças entre as energias aplicadas e os dois tamanhos de bola testados (Figura 5.45). Os resultados mostraram uma função quebra mais fina quando é usada a bola de 40 mm de diâmetro nas duas energias de impacto avaliadas. As observações podem estar relacionadas com a aplicação de energia sobre um número mais reduzido de partículas pela bola de 40 mm em comparação com a bola de 88 mm.

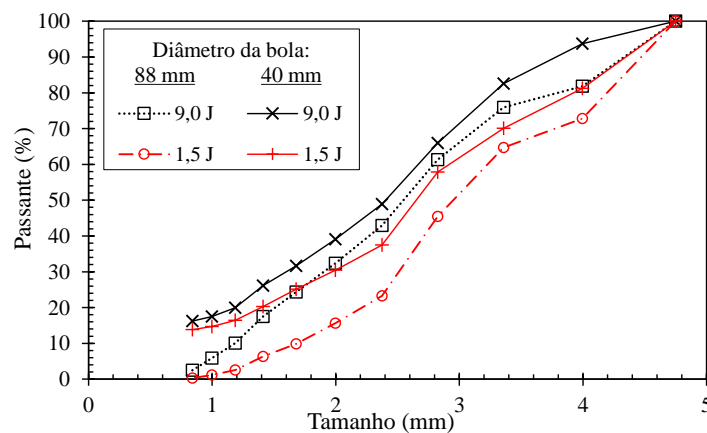


Figura 5.45. Função quebra resultante do impacto de leito em monocamada de três anéis usando bolas de diferente diâmetro (PRM).

O efeito da resistência média à fratura das partículas foi estudado, encontrando funções quebra mais finas quando usadas partículas com menor resistência (Figura 5.46). Nesta, observa-se a comparação da função quebra resultante do impacto com bola de leitos em dois casos. As diferenças residem na energia média de fratura das partículas que conformam o leito.

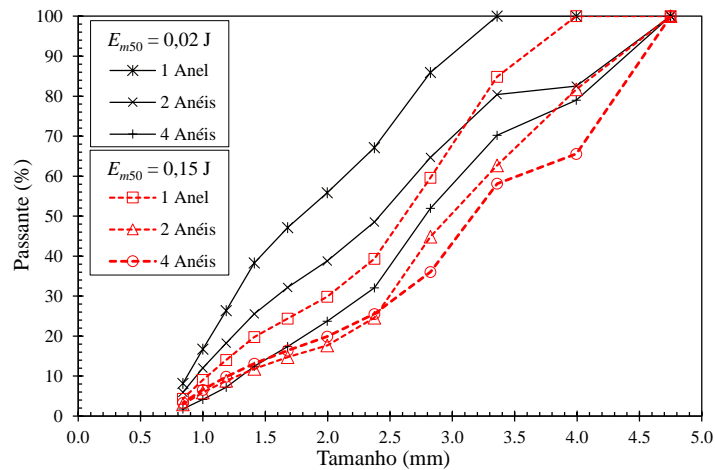


Figura 5.46. Efeito da energia média de fratura de partículas sobre a função quebra resultante em impactos. Bola de 88 mm de diâmetro (PRM).

5.3 Calibração e validação dos modelos de quebra

Nesta seção são apresentadas a calibração e validação dos modelos de quebra com base no minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm. A calibração dos três modelos foi baseada na resistência média do material nesta faixa, a qual equivale aproximadamente a 0,15 Joules. A calibração dos modelos BPM e PRM foi conduzida com base em ensaios de compressão de partícula individual e na análise do correspondente perfil esforço-deformação obtido. Por outro lado, no modelo FBM foram simulados ensaios de impacto com bola e leitos formados por múltiplas partículas.

A validação dos modelos baseou-se na comparação de resultados experimentais e simulados em leitos de partículas, avaliando as propriedades: raio de captura de partículas, massa de partículas quebrada e fragmentação.

5.3.1 Calibração de parâmetros

A presente seção está dividida em quatro partes:

- Calibração dos parâmetros de contato usando o ângulo de repouso
- Calibração do modelo de ligação de elementos
- Calibração do modelo de elementos tetraédricos
- Calibração do modelo de substituição de elementos

5.3.1.1 Calibração dos parâmetros de contato usando o ângulo de repouso

Os parâmetros de contato das partículas virtuais de cobre de Sossego nos modelos de quebra FBM e PRM foram calibrados por meio do ensaio do ângulo de repouso. Em particular, no modelo BPM não foi realizada esta calibração, mas, foi determinado o ângulo de repouso que apresentam as partículas usadas. Isso é explicado pelo esforço computacional excessivamente grande demandado pelo método na simulação do número de partículas ensaiadas, o que inviabilizou essa tarefa. De fato, no experimento real de medida de ângulo de repouso usando partículas de minério de cobre de 9,5 x 6,3 mm foram empregadas, aproximadamente, 2000 partículas.

No modelo FBM e PRM foram modificados os parâmetros de atrito de rolamento e atrito estático entre os materiais, visando atingir o ângulo de repouso experimental, o qual corresponde a 16,5 graus. Na Figura 5.47 apresenta-se a comparação do ângulo experimental e o calibrado usando simulação no DEM. Adicionalmente, é ilustrado o ângulo de repouso que apresentam as partículas usadas no modelo de ligação de elementos. Na Tabela 5.10 são reportados os ângulos finais para cada caso. Nesta é apresentado o ângulo inicial, correspondente ao obtido usando os parâmetros de atrito reais do cobre de Sossego; e o ângulo final, o calibrado ou definido para ser usado nas simulações de validação com cada modelo a fim de reproduzir o ângulo de repouso experimental. É evidente que a combinação dos parâmetros de contato e a forma das metapartículas no BPM, resultou em um ângulo de repouso muito superior àquele calibrado para os demais modelos, além do experimental.

Tabela 5.10. Ângulo de repouso final usado em cada modelo de quebra estudado.

	Ângulo inicial	Ângulo final
Experimental	16,5	16,5
PRM	12,0	16,5
FBM	23.5	16,5
BPM	23,5	23,5

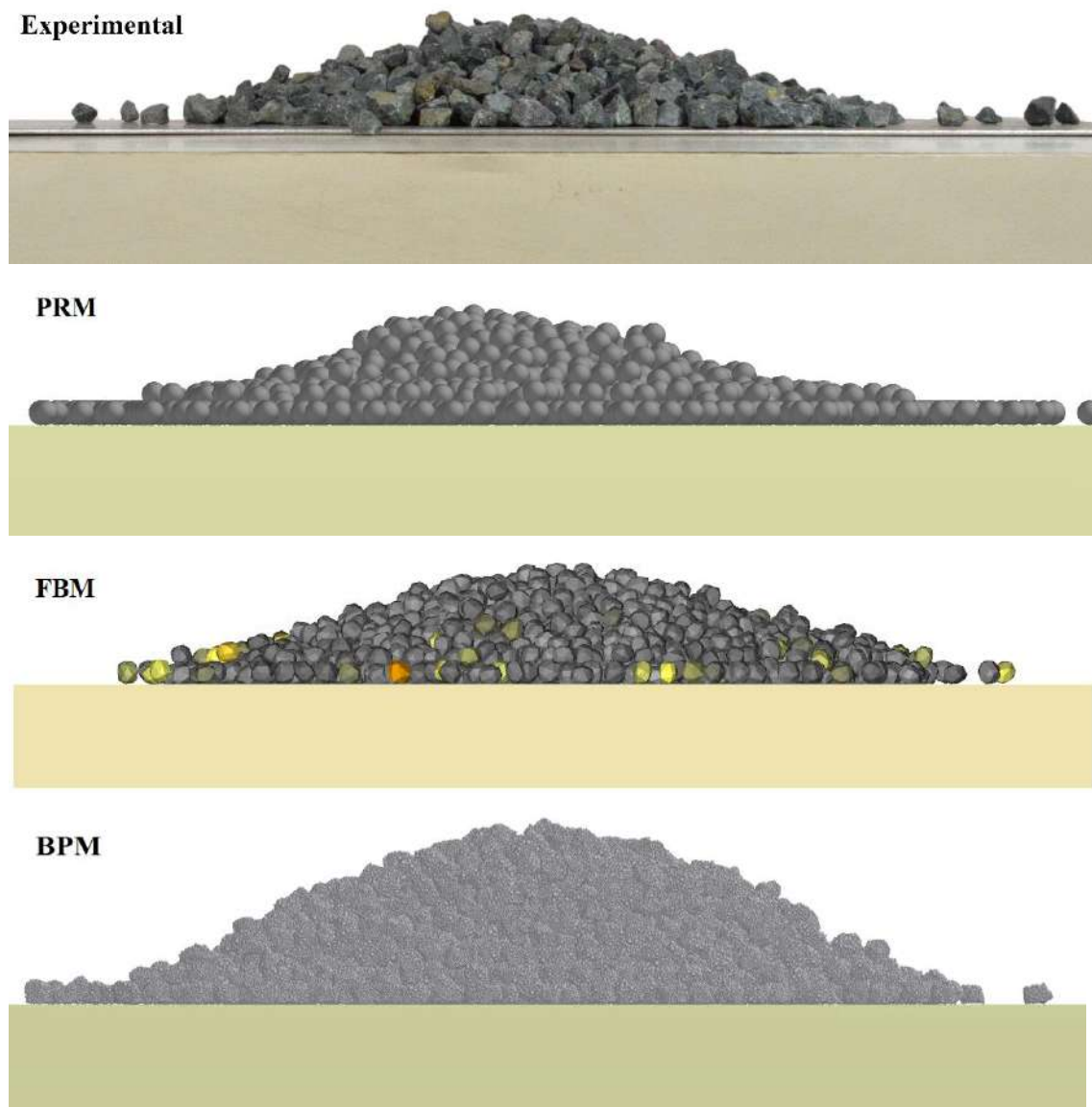


Figura 5.47. Comparação do ângulo de repouso experimental com ângulos de repouso finais nos modelos PRM, FBM e BPM.

5.3.1.2 Calibração do modelo BPM

O procedimento de calibração foi desenvolvido, no qual foram avaliados cinco parâmetros. O procedimento baseou-se num plano fatorial fracionário com posterior otimização da resposta. Por meio deste foi calibrado para as metapartículas modeladas o seu perfil esforço-deformação com base num perfil experimental. As características da quebra por clivagem presente nas partículas do minério de cobre reais poder ser

quantificada mediante o seu perfil esforço-deformação, o qual é característico de materiais rígidos não deformáveis. Algumas das propriedades que podem ser extraídas do perfil são: a força de fratura, a energia de fratura e a deformação.

Os resultados mostraram para a região de parâmetros avaliada que a energia de fratura e a força de fratura da metapartícula são fortemente influenciadas pelo parâmetro de resistência cisalhante - τ_{bs} , sendo este, estatisticamente significativo com um nível de confiança do 95%. Isto é apresentado no gráfico de efeitos normais padronizados (Figura 5.48), no qual também é observado que os demais parâmetros avaliados não são estatisticamente significativos sobre a energia de fratura da metapartícula. Adicionalmente, neste gráfico observa-se o efeito positivo do parâmetro sobre a resposta, ou seja, o seu aumento incide diretamente sobre o aumento na energia de fratura do material. Cabe ressaltar que essas observações não podem ser extrapoladas para outras regiões de parâmetros no espaço.

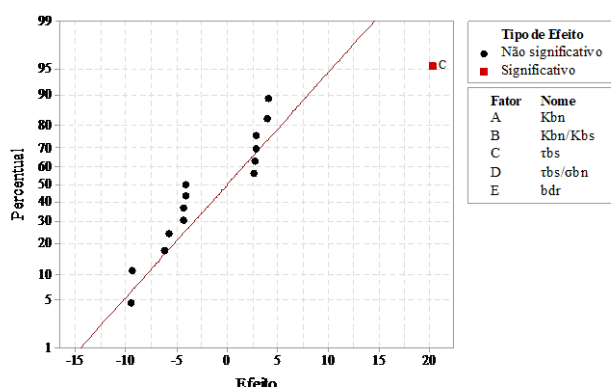


Figura 5.48. Gráfico normal dos efeitos padronizados para a energia de fratura ($\alpha = 0,05$).

Embora na região de estudo os demais parâmetros não se mostraram estatisticamente significativos, estes influenciam a resposta do BPM. Assim, considerando a sua influência na resposta, apresenta-se o gráfico de efeitos principais (Figura 5.49), no qual observa-se que os parâmetros rigidez normal k_{bn} e raio do disco da ligação – bdr influenciam positivamente a resposta. Por outro lado, o aumento das razões k_{bn}/k_{bs} e τ_{bs}/σ_{bn} a influenciam negativamente, fazendo-a menor com o seu incremento.

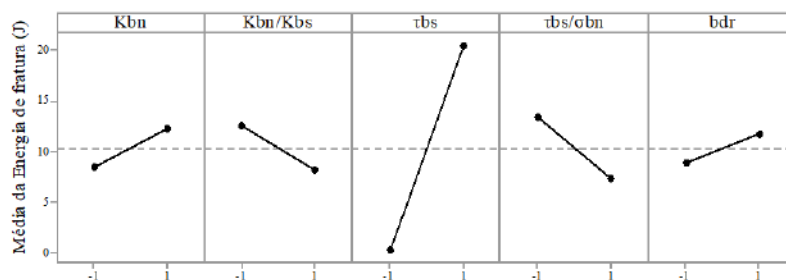


Figura 5.49. Efeitos principais padronizados para a energia de fratura.

Na Figura 5.50 - esquerda, apresenta-se o efeito dos parâmetros τ_{bs} e razão τ_{bs}/σ_{bn} sobre a energia de fratura. A superfície de resposta indica que a razão τ_{bs}/σ_{bn} influencia mais drasticamente a resposta quando são usados altos valores de τ_{bs} (nível +1). Cabe ressaltar que a mudança da razão τ_{bs}/σ_{bn} foi realizada mantendo fixo o valor de τ_{bs} e mudando o valor de σ_{bn} . Assim, indiretamente pode concluir-se que a diminuição do σ_{bn} influencia negativamente a resposta, diminuindo a energia de fratura. Um comportamento semelhante ocorre com a razão k_{bn}/k_{bs} , a qual apresenta uma influência mais forte em valores altos de k_{bn} (nível +1). Deste modo, a resistência do aglomerado é maior quando o valor de k_{bn} está no nível alto e o k_{bs} tem a sua mesma magnitude (Figura 5.50 – direita).

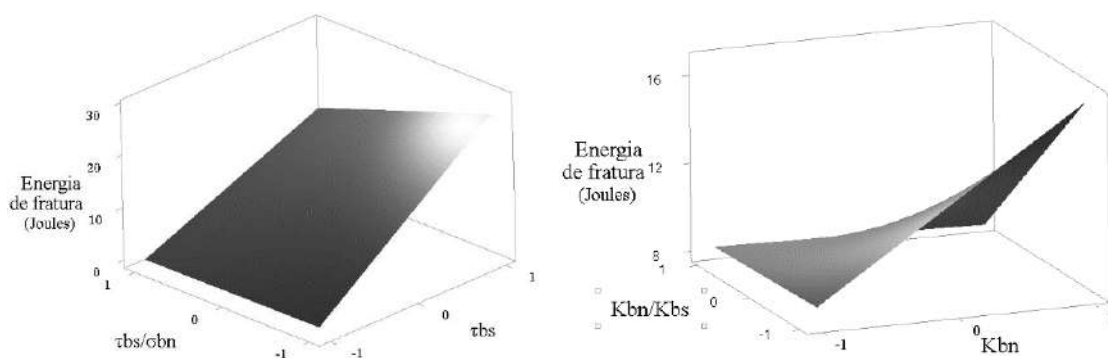


Figura 5.50. Superfície de resposta da energia de fratura na variação dos parâmetros τ_{bs}/σ_{bn} e τ_{bs} (esquerda) e parâmetros k_{bn}/k_{bs} e k_{bn} (direita).

Conforme descrito previamente é possível considerar que a calibração da energia de fratura pode ser atingida de diversas formas, ou seja, alterando o valor de diversos parâmetros indistintamente. No entanto, neste processo se deveria considerar a estabilidade do aglomerado, a qual é afetada por diversas variáveis, tal como se ilustra na

Figura 5.51, onde é apresentado o efeito das variáveis sobre a percentagem acumulada de ligações quebradas até a fratura.

Quando alta, essa medida é um indicador de um aglomerado não corporificado com sucesso, mostrando desmoronamento excessivo quando submetido ao esforço, bem como mostrando padrão de fratura distinta à clivagem. Na sua análise, encontrou-se que altos valores de τ_{bs} favorecem a estabilidade do aglomerado, conservando-se maior quantidade de ligações. Por outro lado e, no sentido inverso, encontra-se o efeito do incremento da variável τ_{bs}/σ_{bn} , a qual prejudica a estabilidade do aglomerado, apresentando maior perda de ligações em valores altos. Um mesmo tipo de influência foi encontrado com as variáveis k_{bn} e bdr , cujo incremento prejudica a estabilidade do aglomerado.

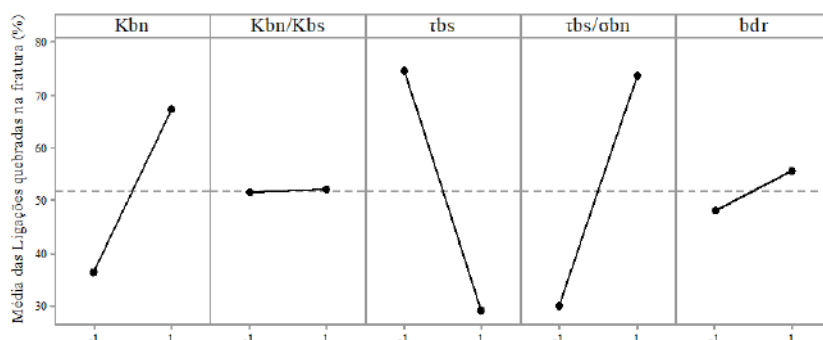


Figura 5.51. Efeitos principais padronizados para a percentagem acumulada e ligações quebradas até a fratura.

As corridas dos experimentos virtuais que ofereceram as características mais próximas do perfil esforço-deformação experimental foram escolhidas e, com base nas considerações descritas, assim como na análise das expressões do modelo BPM apresentadas no Capítulo 2, ajustaram-se ligeiramente os valores dos parâmetros até ser otimizada a resposta.

Como resultado do processo de calibração foram obtidas equivalências do perfil esforço-deformação experimental. Na Figura 5.52 é apresentado o perfil esforço-deformação resultante no ensaio de compressão das partículas usando os parâmetros mostrados na Tabela 5.5. Pode ser observada a semelhança entre o perfil experimental e

o simulado, indicando um bom ajuste das propriedades mecânicas do material simulado com àquelas do material real. Cabe ressaltar que o perfil avaliado corresponde a uma curva representativa da população. A importância deste tipo de curva com um pico evidente de queda é a facilidade de identificar o valor adequado da resistência da partícula, ou seja, o pico que representa a sua fratura (subdivisão em clivagem) (Figura 5.53).

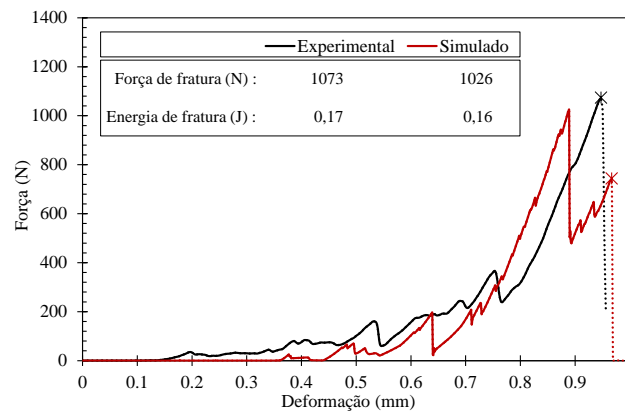


Figura 5.52. Comparação do perfil esforço-deformação experimental e simulado: partícula com energia média de fratura de 0,15 Joules.

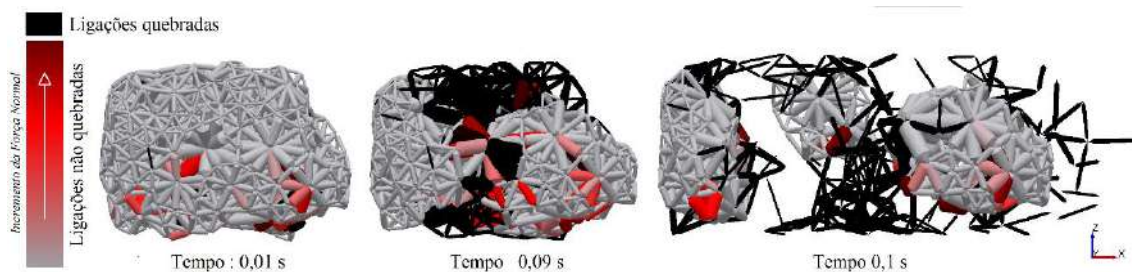


Figura 5.53. Fratura por clivagem de metapartícula no experimento virtual de compressão.

Além do pico de queda em força no perfil, por meio do número de ligações quebradas também é possível determinar o instante de tempo quando ocorre a fratura da partícula. Na Figura 5.54 é apresentado o número de ligações quebradas quando a metapartícula é submetida a esforços. Observa-se que no instante de tempo próximo a 0,1 segundos, a percentagem acumulada de ligações quebradas passa de 30 a 70 %, aproximadamente, ponto esse no qual se observa uma queda em força no perfil esforço-tempo, ou seja, a fratura.

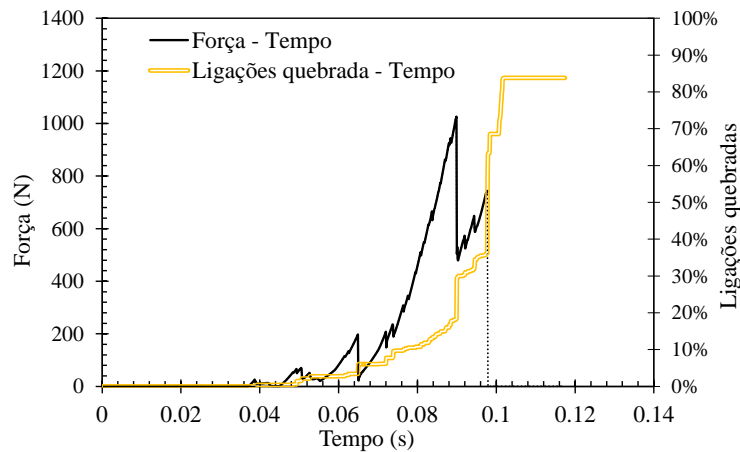


Figura 5.54. Perfil força–tempo simulado e número de ligações quebradas – tempo de partícula individual calibrada virtualmente (BPM).

Considerando o custo computacional resultante do uso do modelo BPM, procurou-se o desenvolvimento de testes virtuais rápidos. Assim, os ensaios virtuais de compressão foram conduzidos com velocidade de descida da placa superior da prensa de 10 mm/s. Embora essa velocidade é maior que a velocidade padrão dos equipamentos de compressão uniaxial reais (0,16 mm/s), virtualmente não se observaram diferenças evidentes nos perfis obtidos em diferentes velocidades (Figura 5.55).

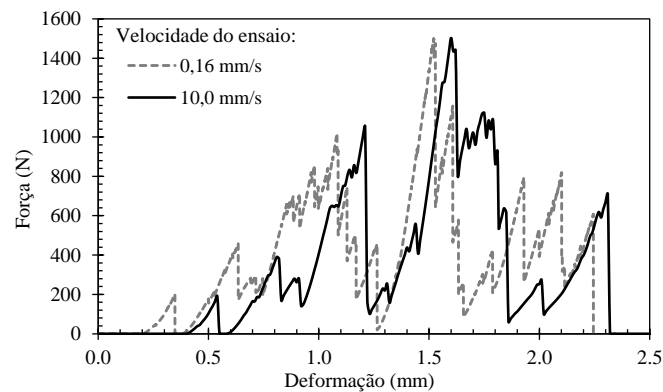


Figura 5.55. Comparação de perfis esforço-deformação obtidas em diferentes velocidades de compressão (BPM).

5.3.1.3 Calibração do modelo FBM

O modelo de probabilidade de quebra de TAVARES e KING (1998) (Equação 2.1) e o modelo t_{10} de TAVARES (2004) (Equação 2.7) foram já validados para os resultados experimentais obtidos com minério de cobre de Sossego. Considerando isto,

no processo de calibração inicialmente foram procuradas equivalências entre estes modelos e as expressões matemáticas implementadas no software Rocky para os parâmetros que caracterizam a quebra deste minério.

Na Figura 5.56 apresenta-se a função de probabilidade resultante da calibração com os parâmetros da Tabela 5.6. Por meio de simulações usando múltiplas partículas (Figura 5.57) encontrou-se a curva de probabilidade da simulação deslocada à direita em relação ao modelo de TAVARES e KING (1998) (alvo de calibração). Assim, os parâmetros taxa de quebra - S e energia mínima de referência - $e_{min,ref}$ foram ajustados, deslocando a curva de probabilidade obtida desde a simulação, permitindo atingir a calibração. Por um lado, a mudança do parâmetro S oferece um deslocamento da função para a direita o a esquerda, oferecendo a possibilidade de ajustar a energia média de fratura. Por outro lado, o parâmetro $e_{min,ref}$, além de influenciar a energia mínima necessária para a fratura das partículas, oferece um aumento ou redução na dispersão das curvas, permitindo assim a calibração de funções com distribuições de energias de fratura estreitas ou amplas. Cabe ressaltar que o efeito da mudança dos demais parâmetros do modelo (Tabela 5.6) sobre a sua resposta é equivalente à oferecida por estes dois parâmetros.

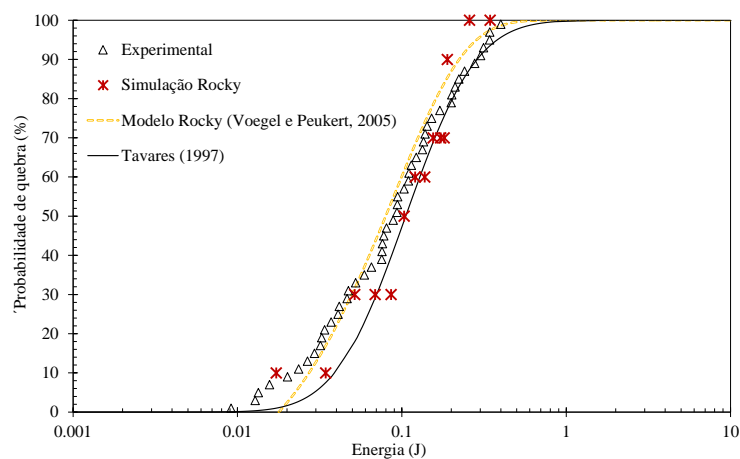


Figura 5.56. Funções de probabilidade de quebra de partículas: Curva do modelo teórico do software Rocky, curva do modelo analítico do TAVARES e KING (1998), pontos simulados e dados experimentais.

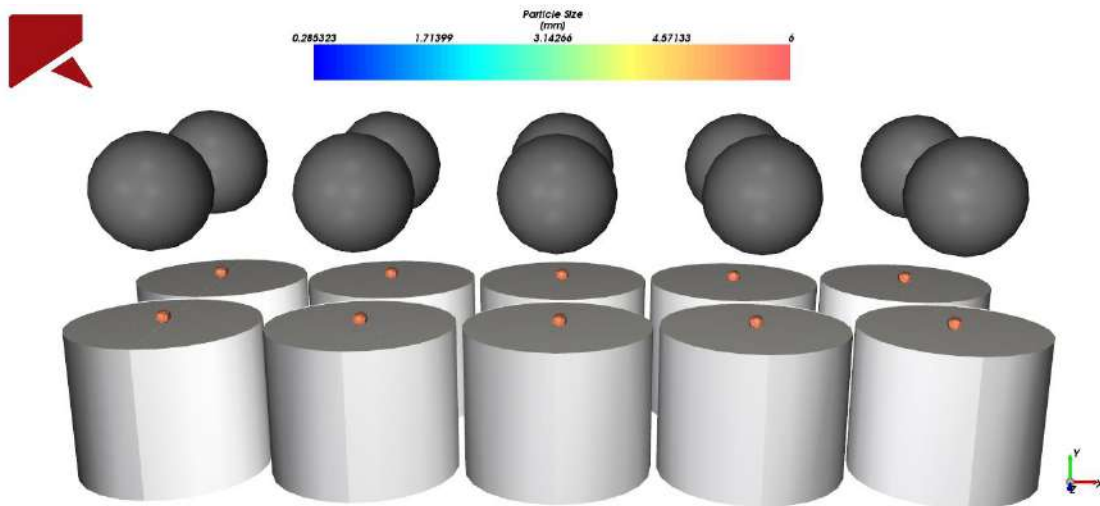


Figura 5.57. Cenário de simulação usado para a calibração do modelo: Fratura de múltiplas partículas individuais de 4,57 mm usando bola de 40 mm de diâmetro.

A escolha do valor do tamanho mínimo da simulação - $x_{min,sim}$ foi realizada considerando obter uma redução ligeiramente menor a 10 % do tamanho da partícula mãe (5,47 mm). O valor definido foi 0,25 mm para diminuir o esforço computacional.

Na Figura 5.58 observa-se a comparação do modelo de t_{10} do Rocky, o modelo de t_{10} de TAVARES (2004) e o resultado da simulação. Cada ponto da simulação medido representa a média dos t_{10} das partículas quebradas individualmente na simulação.

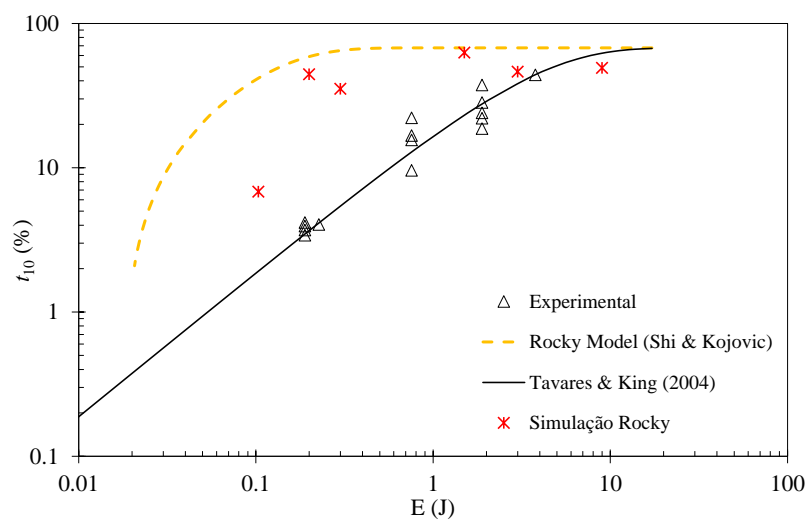


Figura 5.58. Funções para descrever o t_{10} : Curva do modelo do software Rocky 3.11, Modelo de TAVARES (2004), pontos simulados, e pontos experimentais.

As diferenças presentes entre as curvas apresentadas na Figura 5.58 refletem as limitações que existem para calibrar o modelo de quebra do Rocky, visando descrever a probabilidade e o t_{10} simultaneamente. Em outras palavras, calibrando a probabilidade limita-se a calibração do modelo t_{10} , e vice-versa (calibrando o t_{10} impede-se a calibração da probabilidade), tal como é ilustrado na Figura 5.59. Cabe ressaltar que isto é válido em relação a resultados experimentais obtidos desde o LTM e os modelos de referência usados para calibração: TAVARES e KING (1998) e TAVARES (2004).

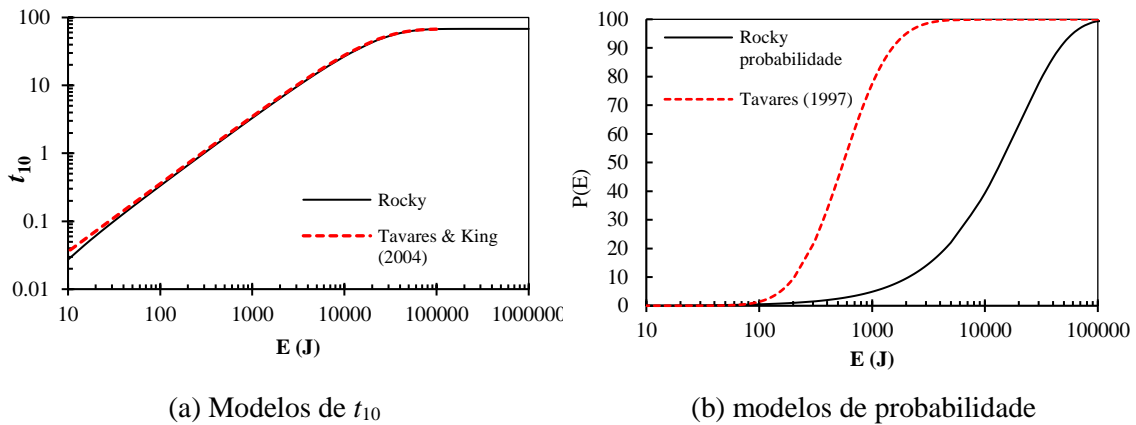


Figura 5.59. Equivalências de modelos quando é realizada a calibração do t_{10} .

Para entender as limitações existentes é importante considerar que os modelos propostos por L.M. Tavares para probabilidade e t_{10} diferem notavelmente em forma, mostrando parâmetros diferentes entre si, sendo apenas o parâmetro E_{m50} comum entre estes (Equação 2.1 e 2.7). Analogamente, os modelos implementados no *software* Rocky para estas duas propriedades apresentam a mesma forma e parâmetros em comum, sendo um único parâmetro o que marca a sua diferença, o parâmetro M , o qual é adicionado no modelo t_{10} e define o ponto da sua saturação. Evidentemente, as semelhanças nas expressões implementadas carecem de graus de liberdade que permitam descrever propriedades tão diferentes simultaneamente.

Diferente do padrão no conceito de t_{10} que existe na área de cominuição, o conceito de probabilidade pode apresentar muitas discrepâncias de autor para autor. Assim, é visto que o modelo de probabilidade de TAVARES e KING (1998) foi validado para descrever a quebra como um evento catastrófico, onde a partícula perde pelo menos 10% do seu peso original. Por outro lado, VOGEL e PEUKERT (2003) validaram os seus resultados

descrevendo a quebra como a fração em massa de partículas menores que o tamanho inicial. Considerando isto, pode-se estabelecer que, para uma determinada energia aplicada, haveria “maior probabilidade” da partícula perder 10% da sua massa do que sair do seu tamanho (considerando uma série geométrica de peneiras dada na classificação). É possível que exista alguma relação entre o previamente descrito e o deslocamento que se apresenta entre as curvas de probabilidade resultantes quando é calibrado o t_{10} (Figura 5.59).

5.3.1.3.1 Fragmentação em partícula individual

A Figura 5.60 apresenta a fragmentação resultante do ensaio virtual de impacto com bola usando três energias diferentes. Nesta, é observada pouca aderência da simulação com os resultados experimentais na energia de 3,0 J. Este desajuste evidencia, mais uma vez, as limitações do FBM em descrever fragmentação e probabilidade de quebra simultaneamente.

Adicionalmente, na Figura 5.60 observa-se o efeito da energia aplicada sobre a fragmentação, apresentando-se funções quebra mais finas quanto maior é a energia aplicada, embora sendo essa diferença mínima para as curvas com energia acima de 1,5 J.

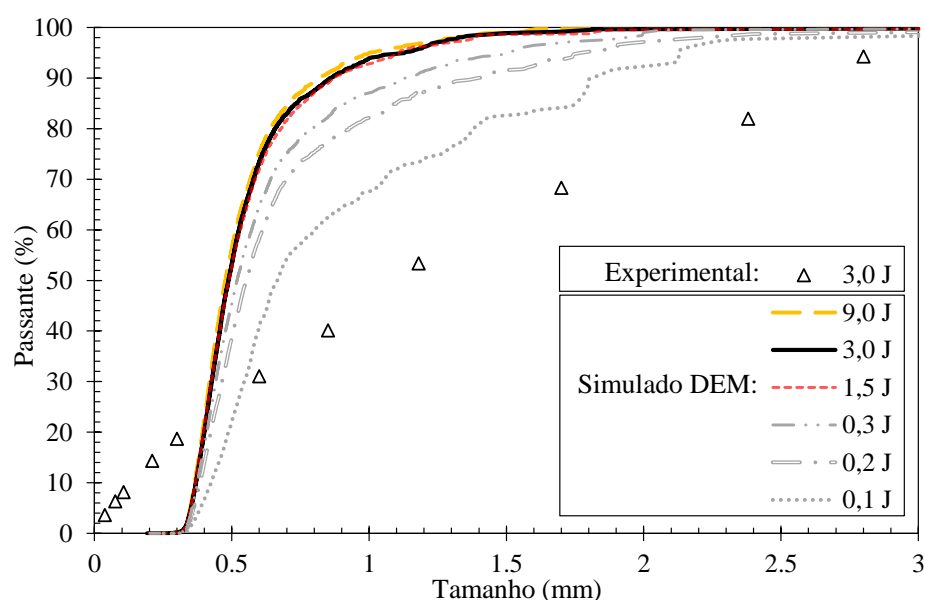


Figura 5.60. Função quebra no impacto de partícula individual usando bola com 88 mm de diâmetro: distribuição experimental, distribuição simulada em diferentes energias aplicadas (FBM).

Na Tabela 5.11 são apresentados diferentes parâmetros t_n correspondentes às curvas apresentadas na Figura 5.60 para as energias avaliadas. Os valores apresentados mostram a capacidade do *software* de oferecer um aumento no valor t_n no aumento da energia. Este efeito parece mais marcado no t_4 e t_2 .

Tabela 5.11. Parâmetros t_n resultantes da simulação.

Parâmetro	Tamanho (mm)	Energia (J)					
		0,1	0,2	0,3	1,5	3,0	9,0
t_{10}	0,547	6,84	44,48	35,26	62,88	46,29	49,2
t_4	1,367	28,59	59,42	80,96	95,95	95,37	96,35
t_2	2,735	38,1	67,05	89,13	99,74	99,60	99,59

Adicionalmente, na Figura 5.60, observa-se que para atingir parcialmente a curva de fragmentação seria necessário aplicar uma energia notavelmente inferior a 0,10 Joules. No entanto, nestas condições o ajuste dos finos seria um outro fator de difícil control, já que o modelo construi inerentemente uma distribuição de tamanhos seguindo o modelo de Gaudin-Schuhmann a partir do tamanho mínimo - $x_{min,sim}$ estabelecido, e passando pelo 1/10 do tamanho de partícula inicial na percentagem definida pelo modelo t_{10} .

As componentes que estão envolvidas na distribuição de tamanhos de partícula resultante no modelo FBM do *software* Rocky são: o algoritmo de Voronoi para subdivisão dos fragmentos, a distribuição de Gaudin-Schuhmann, o tamanho mínimo limite e o valor do parâmetro t_{10} . Aparentemente, o modelo de cominuição contribui na distribuição resultante num único ponto da curva, o t_{10} . A carência de pontos da curva definidos com base num modelo de cominuição parece contribuir na limitação do modelo para representar a fragmentação de forma mais realista, embora seja reproduzido o efeito da intensidade de energia sob a fragmentação.

5.3.1.4 Calibração do modelo PRM

A Calibração do modelo PRM foi desenvolvida usando como critério a energia média de fratura do minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm, a qual corresponde aproximadamente a 0,15 J.

Na Figura 5.61 apresenta-se o cenário de simulação usado para desenvolver a calibração da partícula individual. Nesta, observa-se o esquema virtual de compressão uniaxial com barras planas. Na esquerda e direita observa-se uma partícula e seus fragmentos da quebra primária, respectivamente.

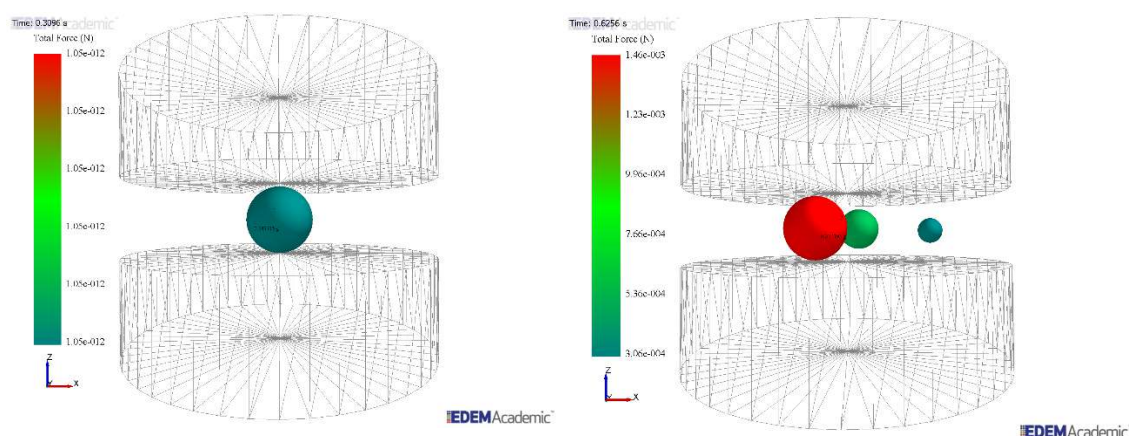


Figura 5.61. Cenário de compressão uniaxial, apresentando a partícula antes e depois da quebra ou substituição, na esquerda e direita, respectivamente.

Na Figura 5.62 observa-se a comparação entre o perfil esforço-deformação experimental e simulado em DEM, usando os parâmetros apresentados na Tabela 5.9. Para a obtenção destes parâmetros foram atribuídos valores iniciais e observado o correspondente resultado da simulação, ajustando-os até se obter o valor esperado na simulação (tentativa-e-erro).

Como é ilustrado na Figura 5.62, embora seja atingida a energia de referência média experimental do minério de cobre de Sossego por meio da simulação, a força média de fratura simulada difere significativamente da média experimental.

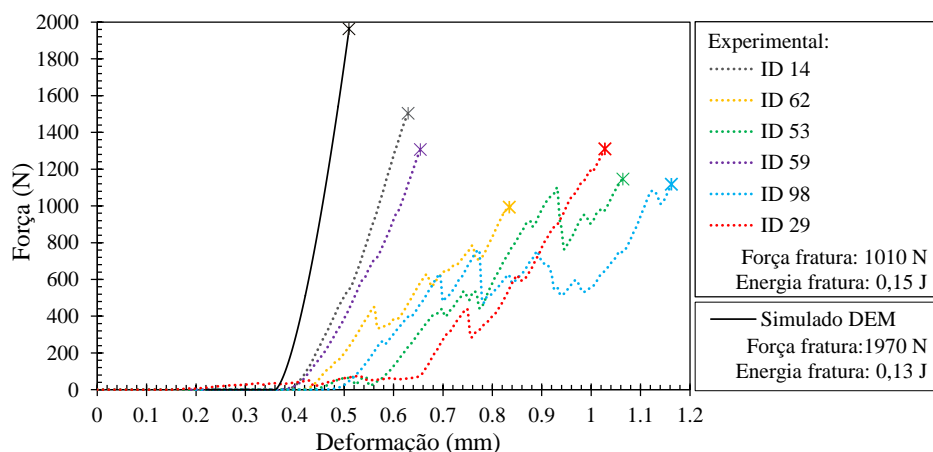


Figura 5.62. Comparação do perfil esforço-deformação experimental e simulado com o PRM.

O PRM é um modelo de quebra instantânea, dessa forma, o perfil de esforço-deformação resultante na quebra (substituição) da partícula é simples, mostrando um pico de força de rápido crescimento (Figura 5.62), o qual representa numericamente no DEM, o avanço do contato entre os dois elementos até o momento que é atingido o critério de substituição. Este trajeto é característico do modelo de contato de Hertz-Mindlin usado no PRM (V3 – EDEM). Isto explica as características do perfil esforço-deformação apresentado comparativamente com os perfis experimentais na Figura 5.62, na qual observa-se que, embora seja calibrada a energia média experimental do minério de cobre de Sossego na simulação, a força média de fratura simulada difere significativamente da média experimental.

Uma estratégia que poderia ser aplicada para realizar a calibração desses dois critérios (força e energia média de fratura) é diminuir a rigidez da partícula, sendo assim absorvida mais energia de deformação. No entanto, no ambiente DEM (*software* EDEM) isto resulta em uma sobreposição muito alta entre os elementos. Na Figura 5.63 apresenta-se o efeito da rigidez (modulo de cisalhamento) sobre a energia de fratura da partícula. Adicionalmente é ilustrada a sobreposição correspondente para cada ponto avaliado. Cabe ressaltar que os resultados apresentados nesta figura são válidos para as condições específicas e parâmetros do presente estudo.

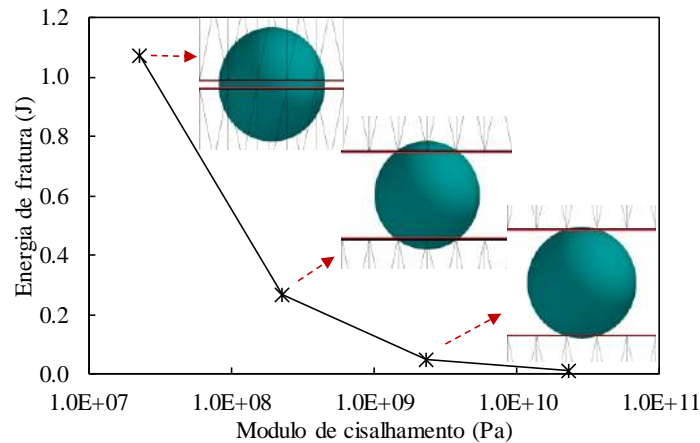


Figura 5.63. Efeito do módulo de cisalhamento sobre a energia de fratura e a correspondente sobreposição entre elementos (neste caso ilustra-se entre a geometria e a partícula).

A energia média de fratura dos fragmentos (classes de tamanho inferiores a 6,3 x 4,75 mm) também foi calibrada (Figura 5.64) com base no modelo de energia média de fratura – E_{m50} (TAVARES e KING, 1998) e dados experimentais. Na Figura 5.64 apresenta-se a resistência média à fratura que apresentam todos os tamanhos de partículas da simulação (fragmentos). A resistência destes influencia na distribuição de tamanhos final, já que no curso de impacto da bola ocorrem eventos de quebra subsequentes, nos quais são fraturados os fragmentos dos primeiros eventos.

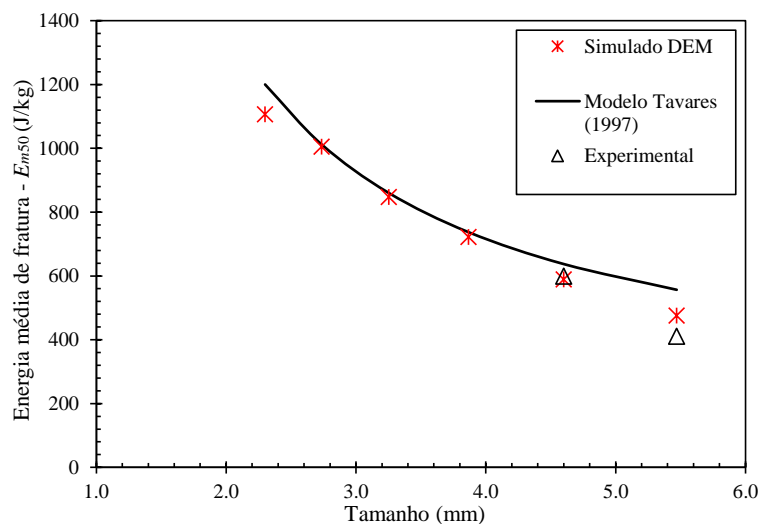


Figura 5.64. Comparação da energia média de fratura de partículas individuais obtida desde modelo analítico, simulação e dados experimentais.

Adicionalmente, foi testado o efeito do histórico da partícula sobre a sua resistência, isto é, os efeitos dos esforços nas partículas mãe sobre a resistência à fratura da progênie. Para tal fim, por meio de compressão foi quebrada uma partícula de 5,47 mm, em seguida, as partículas da progênie e, subsequentemente, as menores, uma por vez. Os resultados desta análise coincidiram com os resultados das partículas sem história previa. Assim, pode-se concluir que os esforços aplicados sobre a partícula mãe não influenciam na resistência das filhas.

Na Figura 5.65 apresenta-se a fragmentação resultante do ensaio virtual de impacto com bola sob partícula individual usando tres energias diferentes. Nesta é comparada a fragmentação experimental e a simulada para 3,0 J. Os resultados mostraram pouca aderência entre as curvas.

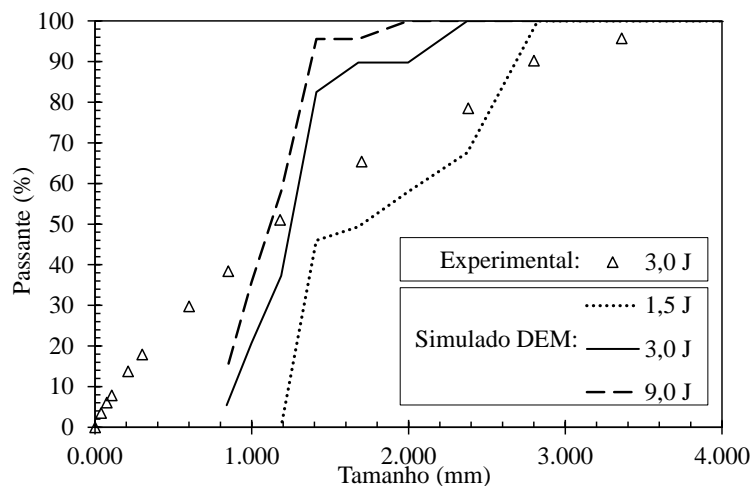


Figura 5.65. Função quebra de impactos de partícula individual usando bola de 88 mm diâmetro com diversas energias: curva experimental e curvas simuladas.

5.3.2 Validação

A validação dos modelos de quebra realizou-se por meio de experimentos de impacto com bola sobre arranjos de partícula em diferentes configurações. Nesta seção são apresentados comparativamente os resultados obtidos com os três modelos de quebra estudados (BPM, FBM e PRM) e os resultados da fratura experimental obtida para o minério de cobre de Sossego na faixa de 6,3 x 4,75 mm.

5.3.2.1 Raio de captura

O raio de captura resultante do impacto de arranjos de partículas virtuais de minério de cobre em monocamada foi comparado com o modelo analítico desenvolvido por BARRIOS *et al.* (2011), sendo este último calculado com base nas constantes a_c , b_c e c_c apresentadas pelo autor e os parâmetros do minério de cobre. Na Figura 5.66 são comparados os resultados obtidos com os diferentes modelos de quebra de partículas estudados e o modelo de raio de captura. Na Figura 5.66 é evidente que todos os modelos conseguem reproduzir a tendência do modelo analítico, mostrando alguma aderência do modelo de ligação de elementos BPM e uma parcial aderência do modelo de substituição de elementos PRM aos resultados experimentais. A menor aderência dos modelos FBM e PRM pode estar relacionada com a sua característica de quebra instantânea, a qual gera uma depressurização da bola no seu curso depois de se apresentar a fratura da partícula mãe, permitindo o seu avanço livremente dentro do leito até encontrar um outro fragmento que o restrinja. Por outro lado, o modelo de ligação de elementos oferece resistência no curso da bola após o impacto, já que a fratura neste modelo é um processo gradual de quebra de ligações individuais até se atingir a fratura macroscópica da partícula.

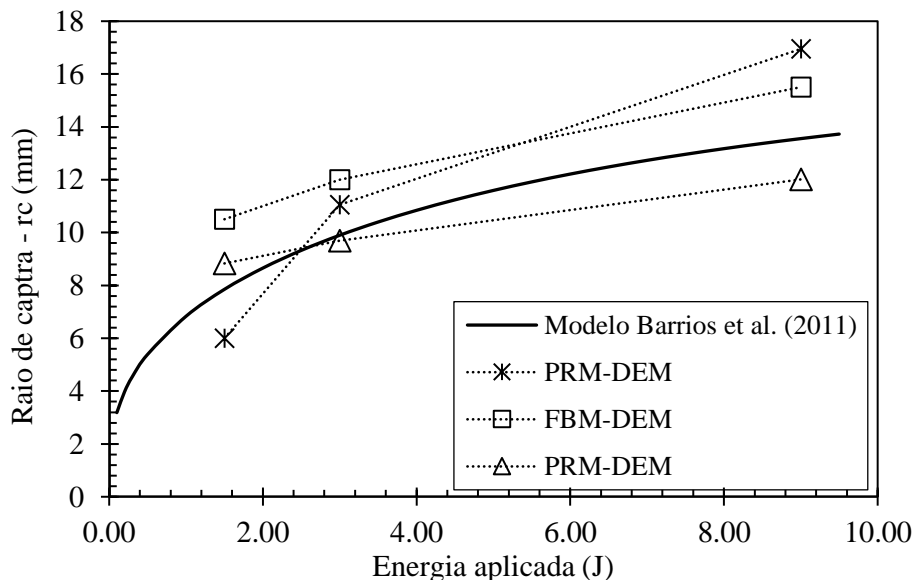


Figura 5.66. Comparação do raio de captura experimental com os três modelos de quebra de partículas: modelo de ligação de elementos – BPM, modelo de elementos tetraédricos – FBM, e modelo de substituição de elementos – PRM. Ensaios realizados sobre leito de monocama

O modelo analítico de raio de captura do BARRIOS *et al.* (2011) foi validado para resultados experimentais obtidos medindo as impressões que as partículas de diversos minérios registravam sobre um papel carbono (disposto abaixo destas) após ser impactadas com uma bola. Ainda sendo usado no ambiente virtual um critério análogo a este, é possível que existam margens de erro entre as medidas em cada caso.

5.3.2.2 Massa quebrada

A massa quebrada de partículas virtuais do minério de cobre de Sossego foi comparada aos resultados experimentais. Na Figura 5.67 são comparados os resultados obtidos com os três modelos de quebra de partículas e por meio de experimentos. É observado que os três modelos conseguem reproduzir o formato da curva experimental, a qual apresenta uma diminuição da massa quebrada com o aumento do número de camadas no arranjo. Dos três modelos estudados, o BPM apresentou o melhor ajuste aos resultados experimentais, encontrando-se uma quantidade de massa quebrada bastante similar em todas as configurações avaliadas. Embora tenha sido calibrada a resistência média de fratura das partículas nos três modelos da mesma forma, os modelos de quebra instantânea FBM e PRM predizem um excesso de massa quebrada em comparação aos resultados experimentais.

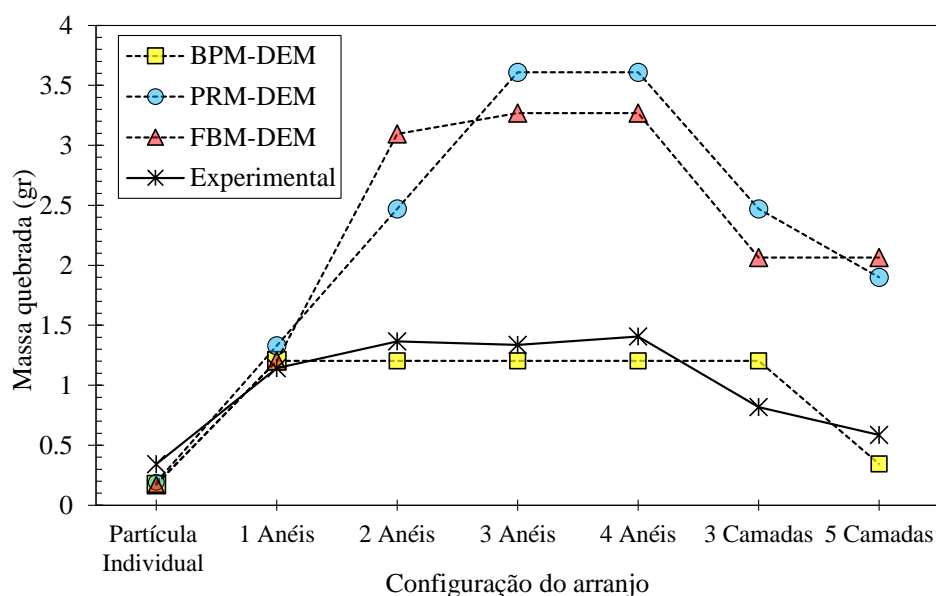


Figura 5.67. Comparação da massa quebrada experimental com os três modelos de quebra de partículas, para arranjos de partículas em diferentes configurações, impactado com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.

5.3.2.3 Fragmentação de leitos de partículas

A função quebra de partículas virtuais de minério de cobre de Sossego dispostas em diferentes arranjos foi obtida mediante ensaios de impacto com bola e foi comparada com resultados experimentais. Na Figura 5.68 e Figura 5.69 apresenta-se, respectivamente, a comparação para arranjos em monocamada com diferentes anéis de partículas, e arranjos em múltiplas camadas. Os resultados mostram um bom ajuste do modelo de substituição de elementos com os resultados experimentais, tanto em monocamada, quanto em múltiplas camadas. Por outro lado, os modelos BPM e FBM mostram pouca aderência nos dois casos. Isto pode estar associado, no primeiro caso (modelo BPM), à distribuição de esferas usada na modelagem da metapartícula. Por outro lado, a falta de ajuste do modelo FBM reside no algoritmo de fragmentação implementado no *software*, o qual combina a distribuição de Gaudin-Schuhmann, o algoritmo de Voronoi, e um modelo t_{10} , sendo este último não calibrado no presente estudo, devido às limitações do modelo.

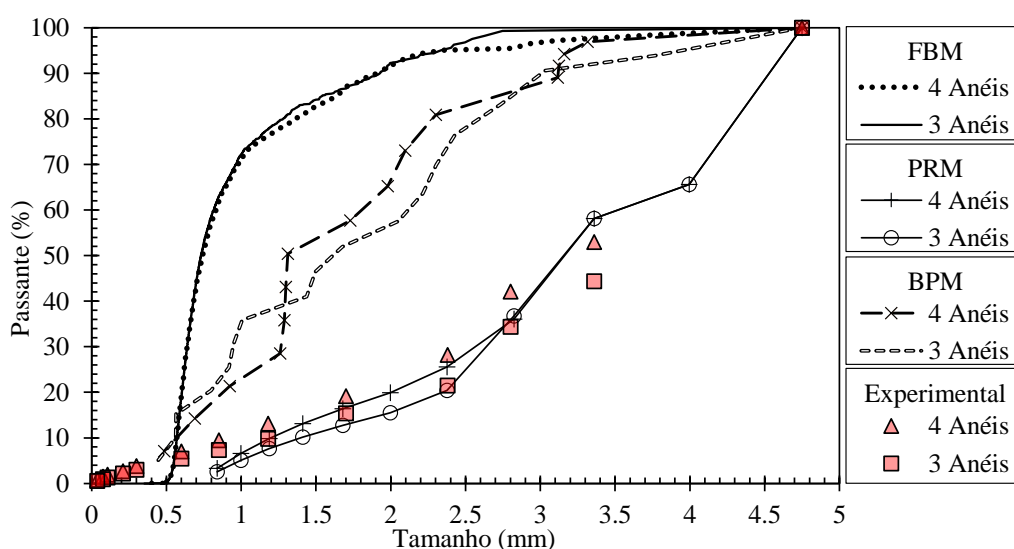


Figura 5.68. Comparação da função quebra experimental com os três modelos de quebra de partículas para leitos de partículas em monocamada com diferentes anéis, impactados com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.

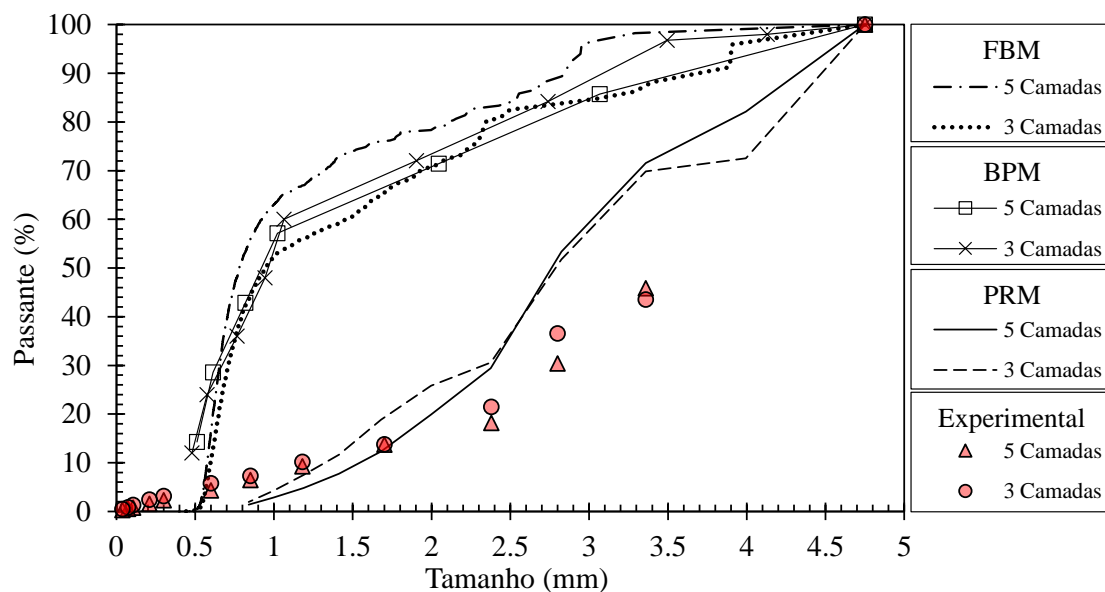


Figura 5.69. Comparação da função quebra experimental com os três modelos de quebra de partículas para leitos de partículas em diferentes camadas, impactados com 3,0 J, usando bola de 88 mm de diâmetro.

Um aspecto a ressaltar de forma comparativa nestes três modelos é a quantidade de fragmentos (elementos) gerados na quebra, os quais foram usados para a construção das curvas de três anéis apresentadas na Figura 5.68 para cada modelo. Enquanto no PRM foram gerados aproximadamente 200 fragmentos, no FBM, foram gerados mais de 7000 fragmentos na quebra. Por outro lado, os fragmentos medidos usando a análise de imagem no BPM (base da curva) não supera os 30, no entanto, a quantidade de esferas usadas para modelar cada uma das 37 partículas neste arranjo apresenta aproximadamente 500 elementos.

O esforço computacional demandado por cada modelo de quebra aqui estudado foi avaliado segundo a perspectiva do autor. Uma medida qualitativa desta característica, juntamente com outras capacidades dos modelos de quebra são expostas comparativamente na Tabela 5.12. Nesta são avaliados cada um dos modelos com base em diferentes critérios e usando uma escala qualitativa (equivalente a uma escala numérica de 0 a 10): “muito baixo” (nota de 0 a 2), “baixo” (de 3 a 4), “médio” (de 5 a 6), “alto” (de 7 a 8) e “muito alto” (de 9 a 10).

Tabela 5.12. Comparação qualitativa das características dos modelos de quebra de partículas BPM e PRM do software EDEM, e o FBM do software ROCKY.

Critério avaliado	Modelo de quebra de partículas/simulador		
	BPM/EDEM	FBM/ROCKY	PRM/EDEM
1 Realismo da simulação	muito alto	alto	baixo
2 Complexidade do modelo para o seu uso	alta	baixa	média
3 Estabilidade da simulação com múltiplas partículas	baixa	média	média
4 Flexibilidade para aplicações com alto número de partículas	baixa	alta	muito alta
5 Flexibilidade para simulação de tempos prolongados	muito baixa	baixa	alta
6 Esforço computacional na modelagem	muito alto	baixo	baixo
7 Esforço computacional na simulação	muito alto	alto	baixo
8 Potencial para desenvolvimento e melhora do modelo	baixo	médio	alto
9 Descrição das propriedades mecânicas	alta	baixa	baixa
10 Resolução na descrição da compressão lenta	alto	baixo	baixo
11 Resolução na descrição de impacto	alto	alto	médio
12 Complexidade na extração de magnitudes	muito alta	baixa	baixa

A avaliação apresentada na Tabela 5.12, além de mostrar o desempenho na descrição de microprocessos de cominuição, permite entender quais seriam as suas limitações para aplicações na simulação de equipamentos de cominuição em escala piloto e industrial. Nesta tabela se evidencia que o modelo de ligação de elementos se caracteriza por apresentar alta resolução na descrição de experimentos de forma muito próxima ao fenômeno físico, no entanto, o esforço computacional que deve ser investido, impediria a sua aplicação em simulações prolongadas (minutos de simulação de equipamentos) e com um número grande de elementos.

Por outro lado, o FBM oferece uma boa descrição da realidade, devido ao ser o único que permite a conservação de massa na quebra, e a descrição da probabilidade de fratura de partículas, contudo, o esforço computacional (em CPU) poderia limitar o desenvolvimento de simulações prolongadas, devido à geração de excessivo de elementos, por causa do mesmo algoritmo de fragmentação.

Finalmente, o PRM embora sendo o menos realista destes três modelos, oferece um custo computacional baixo, o qual permitiria o desenvolvimento de simulações robustas. A versatilidade que caracteriza os modelos de substituição de elementos, oferece um grande potencial de desenvolvimento, que permitiria o acoplamento de diversas características, as quais o fariam mais realista na quebra de minérios. No presente estudo (Seção 5.4), são propostas algumas características que podem ser acopladas num modelo de substituição de elementos avançado. Cabe ressaltar que esta proposta ainda não foi implementada em nenhum simulador DEM.

5.4 Proposta conceitual para modelo de quebra avançado do PRM

Os modelos nas versões estudadas no presente trabalho poderiam ser classificados com base na sua complexidade e grau de desenvolvimento, destacando-se, assim, no topo da lista o BPM e, no último lugar, o PRM. O benefício computacional característico do PRM oferece um alto potencial de desenvolvimento, o que permitiria a articulação de componentes interessantes para aplicações na quebra de minérios, as quais não são descritas nas versões atuais.

Algumas das características que poderiam ser implementadas no modelo de substituição de elementos para aplicações na cominuição são:

1. Descrição do critério de fratura para diversos tamanhos de partículas, considerando uma distribuição estatística de energias de fratura por faixa de tamanho e tipo de minério. Dentro das expressões existentes para representar esse fenômeno se encontra o modelo de probabilidade proposto por TAVARES e KING (1998).
2. Aplicação de esforços acima do critério de fratura, sendo que o grau de fragmentação da partícula deve ser proporcional à intensidade do esforço aplicado. Em outras palavras, as altas intensidades de energia aplicada resultariam em distribuições de tamanhos finas, e nas menores intensidades distribuições grossas.
3. Enfraquecimento das partículas na aplicação de esforços menores ao critério de energia correspondente, o qual é refletido na diminuição da resistência da partícula. Dentro das expressões existentes para representar esse fenômeno é

destacado, por exemplo, o modelo de dano proposto por TAVARES e KING (2002).

Para ilustrar melhor essas três componentes anteriormente descritas, é apresentada a Figura 5.70. Nesta, observa-se um perfil de carga-deslocamento crescente aplicado sobre uma partícula na simulação, onde são apresentadas 3 regiões sobre a curva que representam: os carregamentos inferiores ao critério de fratura (região 1), o carregamento crítico para fratura (região 2), e os carregamentos superiores ao critério de fratura (região 3). Na região 1 são descritas as cargas de baixa magnitude, as quais enfraquecem as partículas. Esse fator, como foi já mencionado, pode ser descrito por meio do modelo de dano de TAVARES e KING (2002). Na região 2 apresenta-se o ponto no qual é atingido o critério de fratura, o qual pode ser descrito com base no modelo de probabilidade de fratura do TAVARES e KING (1998). Finalmente, na região 3 são descritos os esforços superiores à energia de fratura, os quais acrescentam o grau de fragmentação. Para descrever a intensidade de fragmentação é proposto o uso de tabelas padrões de fragmentos esféricos (progênes) para diferentes energias e tipos de minérios.

É importante ressaltar que na presente proposta é excluída a definição de diversas componentes relacionadas à implementação do modelo. Algumas destas são: a definição do ponto de substituição das partículas no intervalo de contato entre elementos, a repartição de energia na colisão de dois ou mais elementos, o sentido de espalhamento dos fragmentos após o esforço, entre outras.

Assim, é proposto um modelo pragmático para a sua aplicação na cominuição, no entanto, este não considera a resposta mecânica dos materiais, descrita em uma boa medida pela riqueza do perfil esforço-deformação não mostrado por este tipo de aproximações numéricas de quebra instantânea.

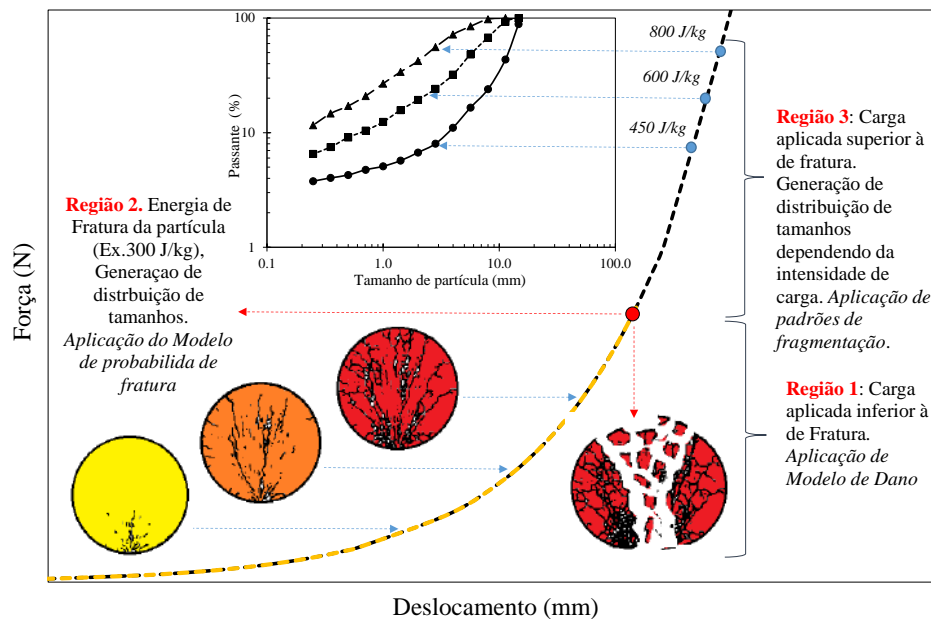


Figura 5.70. Ilustração dos componentes de um modelo avançado de quebra para uso no DEM com base no modelo de substituição de elementos PRM.

5.4.1 Padrões de fragmentação

Um dos primeiros critérios que deve considerar-se para modelar uma distribuição de fragmentos de quebra é o grau de fragmentação em relação à intensidade de energia aplicada, uma vez que a distribuição de tamanhos será mais fina quanto maior é a energia aplicada. Para descrever isto é possível assumir um conjunto de distribuições padrões por energia aplicada. No entanto, é importante considerar que num evento real de quebra, as distribuições de fragmentos obtidas em uma mesma energia aplicada variam de tamanho para tamanho, assim como em um mesmo tamanho. Em outras palavras, se experimentalmente aplicamos esforços individualmente em cem partículas do mesmo material e tamanho até a sua fratura primária, a distribuição de fragmentos obtida com cada partícula vai diferir notavelmente, porém, através da coleta e soma de todos os fragmentos é possível descrever a fragmentação média para esse tamanho de partícula.

Na presente proposta é modelado este fenômeno de variabilidade de fragmentos para uma classe de tamanho usando tabelas padrão, as quais representam diversos conjuntos de fragmentos (famílias de curvas) que podem ser obtidos em um evento de quebra, os quais somados descrevem a fragmentação média de uma classe de tamanho para uma dada intensidade de energia aplicada. A obtenção de cada família de fragmentos foi elaborada usando distribuições de esferas filhas, as quais tiveram aproximadamente a

massa da partícula mãe. Uma explicação mais detalhada é ilustrada em três energias de carregamento.

Por meio da tabela padrão (Tabela 5.13) apresentada a modo de exemplo é possível reproduzir a distribuição de tamanhos do produto gerada em esforços com energia de 2,5 kWh/t. No Anexo 2 apresentam-se exemplos de tabelas para 0,25 e 1,0 kWh/t.

O uso desta tabela deveria ser conduzido da seguinte forma: considerando que para cada partícula da população foi estabelecida uma energia de fratura, quando dita partícula é esforçada numa energia igual ou superior ao valor crítico estabelecido, deve-se procurar dentro das tabelas existentes a energia correspondente. Assim, dentro da tabela deve ser usado um algoritmo de escolha aleatória para selecionar alguma das famílias de fragmentos. Vale ressaltar que a probabilidade de escolha deve ser igual para todas as famílias. Assim, por exemplo, se uma partícula é esforçada com uma energia de 2,5 kWh/t, o algoritmo deve escolher entre as distribuições (famílias de fragmentos) “*d1a*” o “*d2a*” (Tabela 5.13) para ser usada na substituição da partícula mãe fraturada.

Na Tabela 5.13 é apresentado o número de partículas por classe de tamanho nas distribuições experimentais. A classe de tamanho nestas tabelas é representada como uma razão do tamanho inicial (partícula maior da distribuição). Como é mostrado nesta tabela, o número de partículas apresentados não corresponde a um valor inteiro, no entanto, no processo de modelagem teve que ser aproximado o valor visando a conservação da massa, sem sacrificar o formato da curva. Cabe ressaltar que as partículas são representadas como esferas.

A Tabela 5.13 corresponde à tabela padrão modelada para a energia de 2,5 kwh/t, na qual se apresentam duas distribuições de fragmentos (*d1a* e *d2a*). Da mesma forma, no anexo 2 são apresentadas a distribuições de fragmentos para as energias de 1 kWh/t e 0,25 kWh/t, nas quais são descritas seis distribuições de fragmentos (*d1b* – *d6b*) e onze distribuições de fragmentos (*d1c* – *d11c*), respectivamente.

Tabela 5.13. Tabela padrão para 2,5 kwh/t.

Razão do tamanho	Distribuição experimental de tamanhos do produto	Número de partículas		
		d1a	d2a	Total
1	0	0	0	0
0,84	0	0	0	0
0,71	0	0	0	0
0,59	0,10	0	0	0
0,50	0,17	0	0	0
0,42	1,82	2	0	2
0,35	2,85	2	1	3
0,30	5,07	3	2	5
0,25	7,85	5	3	8
0,21	18,39	9	9	18
0,18	27,26	10	17	27
0,15	44,68	16	29	45
0,13	497,54	212	299	511
Total	605,73	259	360	619

As famílias de fragmentos modeladas para cada energia são apresentadas na forma de curvas de distribuição de tamanhos nas Figura 5.71 e Figura 5.72. A curva de cor vermelho nestas figuras, com o nome “média”, representa a soma resultante das famílias de curvas. Adicionalmente é ilustrada a aderência da curva “média” com a curva experimental.

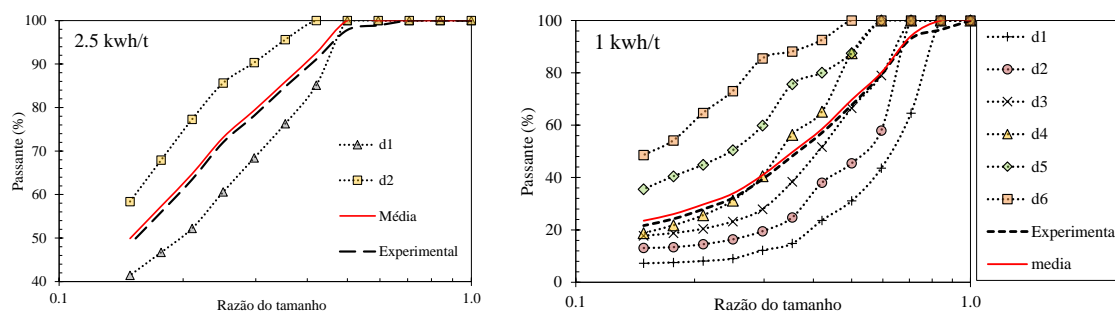


Figura 5.71. Famílias de curvas para 2,5 kWh/t (esquerda) e 1kWh/t (direita).

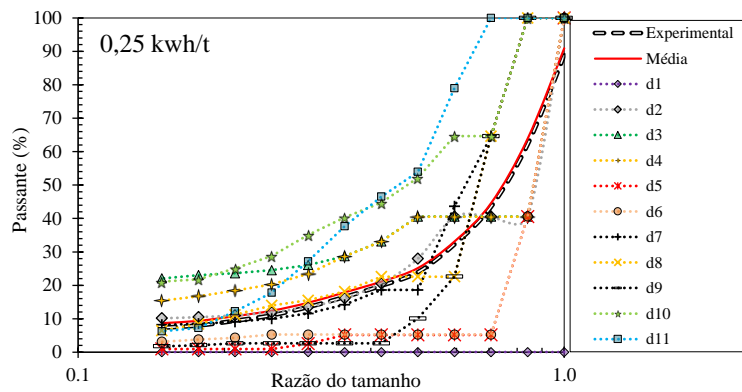


Figura 5.72. Famílias de curvas para 0,25 kWh/t.

Na Figura 5.73 é apresentado o resumo de todas as famílias de curvas usadas para modelar as três energias de fratura. Nesta é ilustrada por meio da curva de cor vermelho (com nome “aleatória”), a soma de uma família aleatória de curvas para reproduzir uma outra curva qualquer encontrada experimentalmente com energias entre 0,25 e 1,0 kWh/t.

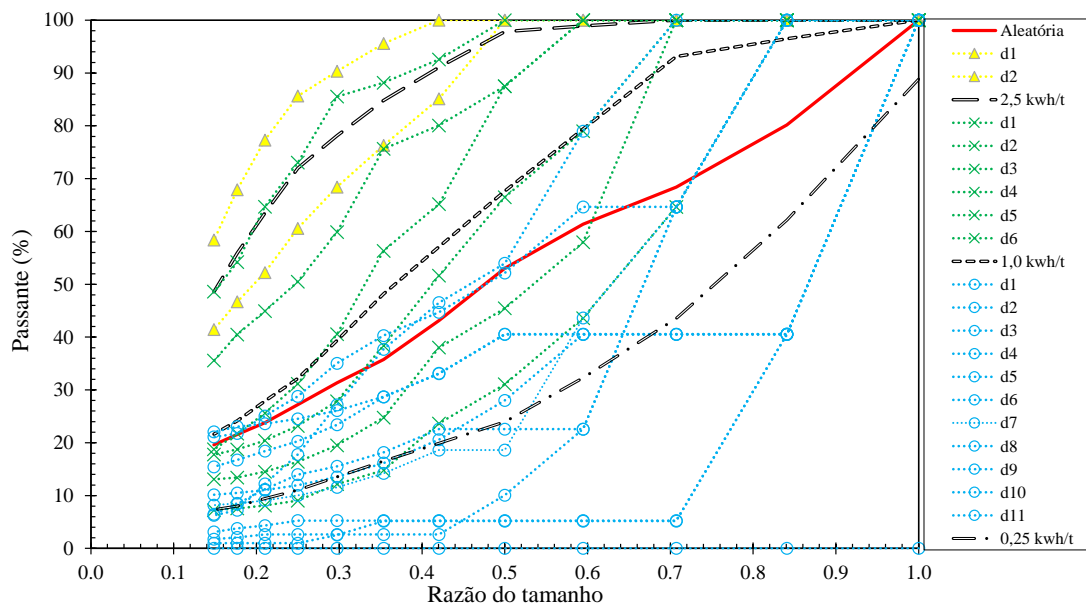


Figura 5.73. Famílias de curvas para as três energias modeladas.

Esse modelo, entretanto, ainda não se encontra disponível em uma plataforma de simulação pelo método dos elementos discretos.

6 CONCLUSÕES

O modelo de ligação de elementos oferece alta resolução na descrição de diversas propriedades mecânicas em uma partícula, refletidas por meio da riqueza do perfil esforço-deformação. Contudo, a instabilidade e o esforço computacional que o caracteriza limita a sua aplicabilidade em sistemas com alto número de partículas. Por outro lado, os modelos de substituição de elementos e o modelo de elementos tetraédricos aqui estudados, não oferecem a descrição de diversas propriedades mecânicas, mostrando no carregamento lento de partículas, um perfil esforço-deformação não realista. O modelo de substituição de elementos permite o desenvolvimento de simulações mais rápidas em comparação com o modelo de elementos tetraédricos e o modelo de ligação de elementos, sendo nestes últimos, respectivamente, o grande número de fragmentos da quebra, e ligações entre elementos, responsáveis pelos grandes esforços computacionais.

O modelo de ligação de elementos implementado no *software* EDEM apresenta fortes limitações na modelagem de experimentos virtuais, assim como no processamento de propriedades após um ensaio. Exemplos são, respectivamente, o complexo processo para inserir variabilidade na quebra de partículas individuais, e a necessidade de usar estratégias externas para o cálculo de distribuição de tamanhos de partículas do produto, tal como a análise de imagem.

O princípio básico de substituição de partículas usado para simular a quebra de partículas no ambiente DEM, oferece um grande potencial de desenvolvimento, o qual permite o acoplamento de diversas propriedades e modelos para descrever a fratura de minérios de forma mais realista. A versão usada de PRM no presente estudo permite a calibração da energia fratura de partículas de diferentes tamanhos, assim como a quebra subsequente destas. No entanto, não é possível inserir variabilidade na energia de fratura, modos de fragmentação de partículas individuais, enfraquecimento das partículas, entre outros aspectos, os quais sim poderiam ser descritos por meio do modelo avançado de PRM proposto no presente estudo.

As estratégias usadas para calibrar e validar os modelos de quebra de partículas do ambiente DEM, mostraram-se adequadas, já que permitiram encontrar as limitações e vantagens dos modelos. A metodologia de calibração das partículas virtuais do minério de cobre difere para cada modelo, sendo o uso de planos experimentais útil na calibração

do perfil esforço-deformação no BPM. A análise de sensibilidade, adequada no PRM. E a comparação da resposta de modelos analíticos de probabilidade e t_{10} com resultados experimentais, acertada na calibração do modelo FBM.

O modelo de elementos tetraédricos – FBM permite a descrição da probabilidade de fratura de partícula e parâmetro t_{10} , embora os modelos atualmente implementados no *software* ROCKY careçam de graus de liberdade que permitam a descrição simultânea destas duas propriedades.

Os três modelos de quebra de partículas do ambiente de simulação DEM abordados apresentam sensibilidade na descrição da captura de partículas, massa quebrada e fragmentação em leitos de partículas não confinados, obtendo-se, respectivamente, maior captura de partículas, massa quebrada e fragmentação mais intensa, quando maior é a energia aplicada com uma bola de aço. Assim mesmo, estes modelos apresentam sensibilidade ao impacto de leitos de partículas usando bolas de diferente diâmetro, sendo reproduzidas diferenças na captura, massa quebrada e fragmentação quando usados diferentes diâmetros de bola.

A captura de partículas, a massa quebrada e a fragmentação resultante da simulação com os modelos de quebra de partículas BPM, FBM e PRM mostraram comportamentos similares, sendo as proporções obtidas diferentes em cada caso:

- Por um lado, o modelo BPM apresenta boa aderência com a massa quebrada de partículas de minério de cobre. Os modelos PRM e FBM, conseguiram reproduzir a tendência de massa quebra em diferentes configurações de leitos, sendo pouca a sua aderência com as proporções experimentais.
- Por outro lado, o modelo de substituição de elementos apresenta boa aderência com a função quebra experimental de diversas configurações de arranjos de partículas. Entretanto, a aderência dos modelos PRM e FBM é baixa.
- Finalmente, na comparação entre o raio de captura simulado e o raio de captura experimental de partículas do minério de cobre por impacto com bola, encontram-se valores próximos com os três modelos de quebra.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

YOON, J. “Application of experimental design and optimization to PFC model calibration in uniaxial compression simulation”. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*. v. 44, p. 871–889, 2007.

AFSHAR, T.; DISFANI, M. M.; ARULRAJAH, A., *et al.*, “Impact of particle shape on breakage of recycled construction and demolition aggregates”. *Powder Technology*, v. 308, p. 1–12, 2017.

AI, J.; CHEN, J. F.; ROTTER, J. M.; *et al.*, “Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations”. *Powder Technology*, v. 206, n. 3, p. 269–282, 2011.

ANTONYUK, S.; KHANAL, M.; TOMAS, J.; *et al.*, “Impact breakage of spherical granules: Experimental study and DEM simulation”. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 45, n. 10, p. 838–856, 2006.

ASKELAND, D. R. The Science and Engineering of Materials. *Materials Science and Engineering A*, v. 212, p. 186–187, 1996.

ÅSTRÖM, J. A.; HERRMANN, H. J. “Fragmentation of grains in a two-dimensional packing”. *The European Physical Journal B*, v. 5, n. 3, p. 551–554, 1998.

AUSTIN, L. G.; CONCHA, F. Diseño y simulación de circuitos de molienda y clasificación. CYTED. *Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo. Subprograma de Tecnología Mienral. Red de Fragmentacion XIII-A*, 1994.

BAGHERZADEH-KHALKHALI, A.; MIRGHASEMI, A. A.; MOHAMMADI, S. “Micromechanics of breakage in sharp-edge particles using combined DEM and FEM”. *Particuology*, v. 6, p. 347–361, 2008.

BANINI, G. A. *An integrated description of rock breakage in comminution machines*. Ph.D. Thesis. The University of Queensland. 2002.

BARRIOS, G. K. P. *Estudo da quebra de leitos de partículas aplicado à modelagem generalizada da cominuição*. Dissertação de M.Sc. Universidade Federal do

Rio de Janeiro, 2010.

BARRIOS, G. K. P.; CARVALHO, R.M, KWADE, *et al.*, “Contact parameter estimation for DEM simulation of iron ore pellet handling”. *Powder Technology*, v. 248, p. 84–93, 2013.

BARRIOS, G. K. P. *Modelagem da Prensa de Rolos usando o Método dos Elementos Discretos com acoplamento dinâmico e o modelo de substituição de partículas*. Tese de D.Sc. Universidade Federal do Rio de Janeiro UFRJ/COPPE, 2015.

BARRIOS, G. K. P.; CARVALHO, R. M.; TAVARES, L. M. “Modeling breakage of monodispersed particles in unconfined beds”. *Minerals Engineering*, v. 24, n. 3–4, p. 308–318, 2011a.

BARRIOS, G. K. P.; DE CARVALHO, R. M.; TAVARES, L. M. “Extending breakage characterisation to fine sizes by impact on particle beds”. *Mineral Processing and Extractive Metallurgy*, v. 120, n. 1, p. 37–44, 2011.

BARRIOS, G. K. P.; PÉREZ-PRIM, J.; TAVARES, L. M. “DEM Simulation of Bed Particle Compression Using the Particle Replacement Model”. In: *Proceedings of the 14th european symposium on comminution and classification*. Gothenburg: 2015

BARRIOS, G. K. P.; TAVARES, L. M. “A preliminary model of high pressure roll grinding using the discrete element method and multi-body dynamics coupling”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 156, p. 32–42, 2016.

BEN-NUN, O.; EINAV, I. “The role of self-organization during confined comminution of granular materials”. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 368, n. 1910, p. 231–247, 2010.

BERRE, T.; IVERSEN, K. “Oedometer test with different specimen heights on a clay exhibiting large secondary compression”. *Geotechnique*, v. 22, n. 1, p. 53–70, 1972.

BOURGEOIS, F. S. *Single Particle Fracture as Basis for Microscale Modeling of Comminution Processes*. Ph.D. Thesis. University of Utah, Salk Lake City, USA, 1993.

BRIGGS, C. A.; BEARMAN, R. A. “An investigation of rock breakage and

damage in comminution equipment”. *Minerals Engineering*, v. 9, n. 5, p. 489–497, 1996.

BROUWERS, H. J. H. “Particle-size distribution and packing fraction of geometric random packings”. *Physical review E*, v. 74, n. 3, p. 31309, 2006.

BROWN, N. J.; CHEN, J.F.; OOI, J. Y. “A bond model for DEM simulation of cementitious materials and deformable structures”. *Granular Matter*. p. 299–311, 2014.

BRUCHMÜLLER, J.; VAN WACHEM, B. G. M.; GU, S.; *et al.*, “Modelling discrete fragmentation of brittle particles”. *Powder Technology*, v. 208, p. 731–739, 2011.

CAMARDA, D.; HAAPAOJA, R.; JOHNSON, F. “Real Time Voronoi Fracturing of Polygon Meshes”. *Vertex*, vol. 1, no v2, p. v3. 2016

CARVALHO, R.M., TAVARES, L.M., SECCHI, A. R. “A new breakage function model and optimization procedure for mechanistic comminution models”. In: *Proceedings of the 14th european Symposium on Comminution and Classification*. Gothenburg: 2015

CARVALHO, R. M. *Desenvolvimento do Modelo Matemático generalizado da cominuição*. Dissertação de M.Sc. Universidade Federal do Rio de Janeiro UFRJ/COPPE, 2009.

CARVALHO, R. M. *Mechanistic Modelling of Semi-Autogenous Grinding*. D.Sc. Tese. Universidade Federal do Rio de Janeiro COPPE/UFRJ, 2013.

CARVALHO, R.M.; TAVARES, L.M.; “Predicting the effect of operating and design variables on breakage rates using the mechanistic ball mill model”. *Minerals Engineering*. v. 43-44, p.91-101, 2013

CHEHREGHANI, S.; NOAPARAST, M.; REZAI, B.; *et al.*, “Bonded-particle model calibration using response surface methodology”. *Particuology*, vol. 32, p. 141-152 2017.

CHO, K. *Breakage Mechanisms in size reduction*. Ph.D. Thesis. The University of Utah, 1986.

CHO, N. Ñ.; MARTIN, C. D.; SEGO, D. C. “A clumped particle model for rock”.

International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences. v. 44, p. 997–1010, 2007.

CHUNG, Y.C. *Discrete element modelling and experimental validation of a granular solid subject to different loading conditions*. Ph.D. Thesis. University of Edinburgh, 2006.

CIL, M. B.; BUSCARNERA, G. DEM. “Assessment of scaling laws capturing the grain size dependence of yielding in granular soils”. *Granular Matter*. vol. 18, no 3, p. 36. 2016.

CLEARY, P. W. “Predicting charge motion, power draw, segregation and wear in ball mills using discrete element methods”. *Minerals Engineering*, v. 11, n. 11, p. 1061–1080, 1998.

CLEARY, P. W. “Recent advances in DEM modelling of tumbling mills”. *Minerals Engineering*, v. 14, n. 10, p. 1295–1319, 2001.

CLEARY, P. W.; SINNOTT, M. D. “Simulation of particle flows and breakage in crushers using DEM: Part 1 - Compression crushers”. *Minerals Engineering*, v. 74, p. 178–197, 2015.

COETZEE, C. J. Review: “Calibration of the discrete element method”. *Powder Technology*, v. 310, p. 104–142, 2017.

COETZEE, C. J.; ELS, D. N. J. “Calibration of discrete element parameters and the modelling of silo discharge and bucket filling”. *Computers and Electronics in Agriculture*, v. 65, n. 2, p. 198–212, 2009.

CUNDALL, P. A. “BALL-A program to model granular media using the distinct element method”. [Technical Note]. *Advanced Technology Group, Dames & Moore*, London, 1978.

CUNDALL, P. A.; STRACK, O. D. L. “A discrete numerical model for granular assemblies”. *Géotechnique*, v. 29, n. 1, p. 47–65, 1979.

DE BONO, J. P.; MCDOWELL, G. R. “Discrete element modelling of one-dimensional compression of cemented sand”. *Granular Matter*, v. 16, n. 1, p. 79–90,

2014.

DE BONO, J. P.; MCDOWELL, G. R. “The fractal micro mechanics of normal compression”. *Computers and Geotechnics*, v. 78, p. 11–24, 2016.

DELANEY, G. W. CLEARY, P. W., SINNOTT, M. D. *et al.*, “Novel application of DEM to modelling comminution processes”. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, v. 10, p. 12099, 2010.

DELANEY, G. W.; MORRISON, R. D., SINNOTT, M. D., *et al.*, “DEM modelling of non-spherical particle breakage and flow in an industrial scale cone crusher”. *Minerals Engineering*, v. 74, p. 112–122, 2015.

DEMSOLUTIONS INC. EDEM Software Version 2.7. Edinburgh (UK), 2016.

DIETER, G. E. Mechanical Metallurgy. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1986.

DJORDJEVIC, N.; SHI, F. N.; MORRISON, R. D. “Applying discrete element modelling to vertical and horizontal shaft impact crushers”. *Minerals Engineering*, v. 16, n. 10, p. 983–991, 2003.

DOSTA, M.; DALE, S.; ANTONYUK, S.; WASSGREN, C.; *et al.*, “Numerical and experimental analysis of influence of granule microstructure on its compression breakage”. *Powder Technology*, v. 299, p. 87–97, 2016.

FUERSTENAU, D. W.; GUTSCHE, O.; KAPUR, P. C. “Confined particle bed comminution under compressive loads”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 44–45, p. 521–537, 1996.

FUERSTENAU, D. W.; SHUKLA, A.; KAPUR, P. C. “Energy consumption and product size distributions in choke-fed, high-compression roll mills”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 32, n. 1–2, p. 59–79, 1991.

EFFEINDZOUROU, A.; CHAREYRE, B.; THOENI, K.; *et al.*, “Modelling of deformable structures in the general framework of the discrete element method”. *Geotextiles and Geomembranes*, v 44, n. 2, 143-156. 2016.

GERCEK, H. “Poisson’s ratio values for rocks”. *International Journal of Rock*

Mechanics and Mining Sciences, v. 44, n. 1, p. 1–13, 2007a.

GORYACHEVA, I. G. “Contact mechanics in tribology”. *Springer Science & Business Media*, v. 61, 2013

GRIFFITH, A. A. “Phenomena of rupture and flow in solids”. *Phil. Trans. Roy. Soc. (London)*, 1920.

GRIFFITH, A. A. “The theory of fracture”. *Proc. First Int. for Applied Mechanics*. Delft: 1924

GROOT, R. D.; STOYANOV, S. D. “Close packing density and fracture strength of adsorbed polydisperse particle layers”. *Soft Matter*, v. 7, n. 10, p. 4750–4761, 2011.

HANLEY, K. J.; O'SULLIVAN, C.; OLIVEIRA, J. C.; *et al.*, “Application of Taguchi methods to DEM calibration of bonded agglomerates”. *Powder Technology*, v. 210, n. 3, p. 230–240, 2011.

HANLEY, K. J.; O'SULLIVAN, C.; HUANG, X. “Particle-scale mechanics of sand crushing in compression and shearing using DEM”. *Soils and Foundations*, v. 55, n. 5, p. 1100–1112, 2015.

HERBST, J. A.; FUERSTENAU, D. W. “Scale-up procedure for continuous grinding mill design using population balance models”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 7, n. 1, p. 1–31, 1980.

HERBST, J. A.; POTAPOV, A. V. “Making a discrete grain breakage model practical for comminution equipment performance simulation”. *Powder Technology*, v. 143–144, p. 144–150, 2004.

HERTZ, H. “On the contact of elastic solids”. *J. Reine und Angew Math.*, n. 92, p. 156–171, 1882.

HOSSEININIA, E. S.; MIRGHASEMI, A. A. “Numerical simulation of breakage of two-dimensional polygon-shaped particles using discrete element method”. *Powder Technology*. v. 166, p. 100–112, 2006.

LI, H., MCDOWELL, G., LOWNDES, I “Discrete element modelling of a rock

cone crusher”. *Powder Technology*, v. 263, p. 151–158, 2014.

HULBURT, H. M.; KATZ, S. “Some problems in particle technology. A statistical mechanical formulation”. *Chemical Engineering Science*, v. 19, p. 555–574, 1964.

IMAGIRE, T.; JOHAN, H.; NISHITA, T. “A fast method for simulating destruction and the generated dust and debris”. *The Visual Computer*. p. 719–727, 2009.

KARRA, V. K. “A process performance model for ore crushers”. In: *Proc. 4th, Int. Min. Proc. Congress*. Toronto: 1982

KHANAL, M.; SCHUBERT, W.; TOMAS, J. “Discrete element method simulation of bed comminution”. *Minerals Engineering*, v. 20, n. 2, p. 179–187, 2007.

KHANAL, M.; SCHUBERT, W.; TOMAS, J. “Oblique impact simulations of high strength agglomerates”. In: *Micro-Macro-interaction. Structured media and Particle Systems*, v. 20, n. 2, p. 243–253, 2008.

KING, R. P. *Modeling and Simulation of Mineral Processing Systems*. Elsevier, 2001.

KOU, S. Q., LIU, H. Y., LINDQVIST, P. A., *et al.*, “Numerical investigation of particle breakage as applied to mechanical crushing—Part II: Interparticle breakage”. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v 38, n8, 1163-1172. 2001.

LICHTER, J; LIM, K.; POTAPOV, A.; *et al.*, “New developments in cone crusher performance optimization”. *Minerals Engineering*, v. 22, n. 7–8, p. 613–617, 2009.

LISJAK, A.; GRASSELLI, G. “Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering A review of discrete modeling techniques for fracturing processes in discontinuous rock masses”. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, v. 6, n. 4, p. 301–314, 2014.

LIU, J.; SCHÖNERT, K. “Modelling of interparticle breakage”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 44–45, p. 101–115, 1996.

LOBO-GUERRERO, S.; VALLEJO, L. E. “Crushing a weak granular material: experimental numerical analyses”. *Géotechnique*, v. 55, n. 3, p. 245–249, 2005.

LU, G.; THIRD, J. R.; MÜLLER, C. R. “Discrete element models for non-spherical particle systems : From theoretical developments to applications”. *Chemical Engineering Science*. v. 127, p. 425–465, 2015.

MARIGO, M.; STITT, E. H. “Discrete element method (DEM) for industrial applications: Comments on calibration and validation for the modelling of cylindrical pellets”. *KONA Powder and Particle Journal*, v. 32, n. 32, p. 236–252, 2015.

MCDOWELL, G. R.; DE BONO, J. P. “On the micro mechanics of one-dimensional normal compression”. *Géotechnique*, v. 63, n. 11, p. 895–908, 2013.

MCDOWELL, G. R.; DE BONO, J. P. “DEM of triaxial tests on crushable sand”. *Granular Matter*. p. 551–562, 2014a.

MCDOWELL, G. R.; DE BONO, J. P. “Discrete element modelling of one-dimensional compression of cemented sand”. *Granular Matter*. p. 79–90, 2014b.

METZGER, M. J.; GLASSER, B. J. “Numerical investigation of the breakage of bonded agglomerates during impact”. *Powder Technology*, v. 217, p. 304–314, 2012.

METZGER, M. J.; GLASSER, B. J. “Simulation of the breakage of bonded agglomerates in a ball mill”. *Powder Technology*, v. 237, p. 286–302, 2013.

MILIN, L. *Modeling the t_{10} x t_n relationship by the incomplete beta function*. University of Utah, 1994.

MINDLIN, R. “Compliance of elastic bodies in contact”. *J. Appl Mech*, n. 16, p. 259–268, 1949.

MINDLIN, R.; DERESIEWICZ, H. “Elastic spheres in contact under varying oblique forces”. *J Appl Mech*, n. 20, p. 237–344, 1953.

MISHRA, B. K. K.; RAJAMANI, R. K. “The discrete element method for the simulation of ball mills”. *Applied Mathematical Modelling*, v. 16, n. 11, p. 598–604, 1992.

MISHRA, B. K.; THORNTON, C. “Impact breakage of particle agglomerates”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 61, n. 4, p. 225–239, 2001.

MONTEIRO, L. V. XAVIER, R. P.; DE CARVALHO, E. R.; *et al.*, Spatial and temporal zoning of hydrothermal alteration and mineralization in the Sossego iron oxide – copper – gold deposit , Carajás Mineral Province , Brazil : paragenesis and stable isotope constraints. *Mineralium Deposita*. 43.2, 129-159. 2008.

MONTGOMERY, D. C. Design and Analysis of Experiments. 7a. ed. New York, USA: *John Wiley & Sons*, 2009.

MORRISON, R. D.; SHI, F.; WHYTE, R. “Modelling of incremental rock breakage by impact - For use in DEM models”. *Minerals Engineering*, v. 20, n. 3, p. 303–309, 2007.

NAPIER-MUNN, T. J. MORRELL, S.; MORRISON, R. D.; *et al.*, Mineral Comminution Circuits: Their operation and optimization (Vol. 2). *Julius Kruttschnitt Mineral Research Centre*, University of Queensland. 1996.

NARAYANAN, S. S.; WHITEN, W. J. “Breakage characteristics of ore ball mill modelling”. In: *Proceedings AusIMM*, v. 286, p. 31–39, 1983.

PALUSZNY, A.; TANG, X.; NEJATI, M.; *et al.*, “A direct fragmentation method with Weibull function distribution of sizes based on finite- and discrete element simulations”. *International Journal of Solids and Structures*, 2015.

PATWA, A.; AMBROSE, R. P. K.; CASADA, M. E. “Discrete element method as an approach to model the wheat milling process”. *Powder Technology*, v. 302, p. 350–356, 2016.

POTAPOV, A.; HERBST, J. H.; SONG, M.; *et al.*, “A DEM-PBM fast breakage model for simulation of comminution processes”. In: *Proceedings of the MEI Discrete Element Methods (DEM) 07 conference*. 2007

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S. “Computer simulation of impact-induced particle breakage”. *Powder Technology*, v. 81, p. 207–216, 1994.

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S. “A three-dimensional simulation of brittle solid fracture”. *International Journal of Modern Physics C*, v.7, n.5, p. 717–729, out. 1996.

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S. “The two mechanisms of particle impact breakage and the velocity effect”. *Powder Technology*, v. 93, p. 13–21, 1997.

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S. “The breakage induced by a single grinding ball dropped onto a randomly packed particle bed”. *Powder Technology*, v. 107, p. 108–117, 2000.

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S.; HOPKINS, M. “Computer simulation of particle fracture”. *Interner Bericht ANL*, v. 7126, 1992.

POTAPOV, A. V.; CAMPBELL, C. S.; HOPKINS, M. A. “A two-dimensional dynamic simulation of solid fracture part II: examples”. *International journal of modern physics C*, v. 6, n. 3, p. 399–425, 1995.

POTAPOV, A. V.; HOPKINS, M. A.; CAMPBELL, C. S. “A two-dimensional dynamic simulation of solid fracture part I: description of the model”. *International Journal of Modern Physics C*, v. 6, n. 3, p. 371–398, 1995.

POTYONDY, D. O.; CUNDALL, P. A. “A bonded-particle model for rock”. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v. 41, n. 8, p. 1329–1364, 2004.

POTYONDY, D. O.; CUNDALL, P. A.; LEE, C. A. “Modelling rock using bonded assemblies of circular particles”. In: *2nd North American Rock Mechanics symposium*. American Rock Mechanics Association, 1996

QUIST, J.; EVERTSSON, C. M. “Cone crusher modelling and simulation using DEM”. *Minerals Engineering*, v. 85, p. 92–105, 2016.

REFAHI, A.; AGHAZADEH MOHANDESI, J.; REZAI, B. “Discrete element modeling for predicting breakage behavior and fracture energy of a single particle in a jaw crusher”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 94, n. 1–2, p. 83–91, 2010.

ROCKYDEM INC. Rocky Software Version 3.11, 2016.

ROCKY DEM INC. User guide Rocky Software Version 3.11. 2015.

RUMPF, H. “Physical aspects of comminution and new formulation of a law of comminution”. *Powder Technology*, v. 7, n. 3, p. 145–159, 1973.

SAEIDI, F.; TAVARES, L. M.; YAHYAEI, M., *et al.*, “A phenomenological model of single particle breakage as a multi-stage process”. *Mineral Engineering*. v. 98, p. 90–100, 2016.

SCHILDE, C.; BURMEISTER, C. F.; KWADE, A. “Measurement and simulation of micromechanical properties of nanostructured aggregates via nanoindentation and DEM-simulation”. *Powder Technology*, v. 259, p. 1–13, 2014.

SCHÖNERT, K. “Comminution from Theory to Practice”. In: *Proceedings of the XIX International Mineral Processing Congress*. 1995

SCHÖNERT, K. “The influence of particle bed configurations and confinements on particle breakage”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 44–45, n. 95, p. 1–16, 1996a.

SCHUBERT, W.; KHANAL, M.; TOMAS, J.” Impact crushing of particle-particle compounds - Experiment and simulation”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 75, n. 1–2, p. 41–52, 2005.

SHI, F.; KOJOVIC, T. “Validation of a model for impact breakage incorporating particle size effect”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 82, n. 3, p. 156–163, 2007.

SHIMIZU, V. K. *Classificação e caracterização de tipos de minérios de cobre da Mina do Sossego-região de Carajás*. Dissertação de M.Sc. Universidade de São Paulo, 2012.

SINNOTT, M. D.; CLEARY, P. W. “Simulation of particle flows and breakage in crushers using DEM: Part 2 - Impact crushers”. *Minerals Engineering*, v. 74, p. 163–177, 2015.

SPETTL, A. DOSTA, M.; ANTONYUK, S.; *et al.*, “Statistical investigation of agglomerate breakage based on combined stochastic microstructure modeling and DEM simulations”. *Advanced Powder Technology*, v. 26, n. 3, p. 1021–1030, 2015.

TANG, C.A. "Numerical simulation of progressive rock failure and associated seismicity." *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v 34, n 2, 249-261.1997

TANG, C. A.; XU, X. H.; KOU, S. Q.; *et al.*, “Numerical investigation of particle breakage as applied to mechanical crushing—part I: single-particle breakage”. *International journal of rock mechanics and mining sciences*, v 38, n 8, 1147-1162. 2001.

TAVARES, L. M.; KING, R. P. “Single-particle fracture under impact loading”. *International Journal of Mineral Processing*, v. 54, p. 1–28, 1998.

TAVARES, L. M. *Microscale investigation of particle breakage applied to the study of thermal and mechanical predamage*. Ph.D. Thesis. The University of Utah, 1997.

TAVARES, L. M. “Role of particle microstructure in comminution”. In: *Proceedings of the XXI International Mineral Processing Congress*.2000

TAVARES, L. M. “Optimum routes for particle breakage by impact”. *Powder Technology*, v. 142, n. 2–3, p. 81–91, 2004.

TAVARES, L. M. “Chapter 1 Breakage of Single Particles: Quasi-Static”. *Handbook of Powder Technology*, v. 12, n. 21, p. 3–68, 2007.

TAVARES, L. M.; DE CARVALHO, R. M. “Modeling breakage rates of coarse particles in ball mills”. *Minerals Engineering*, v. 22, n. 7–8, p. 650–659, 2009.

TAVARES, L. M.; KING, R. P. “Modeling of particle fracture by repeated impacts using continuum damage mechanics”. *Powder Technology*, v. 123, n. 2–3, p. 138–146, 2002.

TAVARES, L. M.; NEVES, P. B. “Microstructure of quarry rocks and relationships to particle breakage and crushing”. *International Journal of Mineral*

Processing, v. 87, p. 28–41, 2008.

THORNTON, C.; CIOMOCOS, M. T.; ADAMS, M. J. “Numerical simulations of agglomerate impact breakage”. *Powder Technology*, v. 105, p. 74–82, 1999.

THORNTON, C.; YIN, K. K.; ADAMS, M. J. “Numerical simulation of the impact fracture and fragmentation of *agglomerates*”. *Journal of Physics D: Applied Physics* v. 424, 1995.

TSOUNGUI, O.; VALLET, D.; CHARMET, J. C. “Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials”. *Powder Technology*, v. 105, n. 1–3, p. 190–198, 1999.

TSUJI, Y.; TANAKA, T.; ISHIDA, T. “Lagrangian simulation of plug flow of collisionless particles in a horizontal pipe”. *Powder Technology*, v. 71, p. 239–250, 1992.

VOGEL, L.; PEUKERT, W. “Breakage behaviour of different materials — construction of a mastercurve for the breakage probability”. *Powder Technology*, v. 129, p. 101–110, 2003.

VOGEL, L.; PEUKERT, W. “Determination of material properties relevant to grinding by practicable lab-scale milling tests”. *International Journal of Mineral Processing*, p. 329–338, 2004.

VOGEL, L.; PEUKERT, W. “From single particle impact behaviour to modelling of impact mills”. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 5164–5176, 2005.

WALTON, I. O.; BRAUN, R. L. “Stress calculations for assemblies of inelastic spheres in uniform shear”. *Acta mechanica*, v. 63, n. 1–4, p. 73–86, 1986.

WEERASEKARA, N. S. POWELL, M. S., CLEARY, P. W., *et al.*, The contribution of DEM to the science of comminution. *Powder Technology*, v. 248, p. 3–4, 2013

WEIBULL, W. “A statistical distribution function of wide applicability”. *Journal of applied mechanics*, v. 18, n. 3, p. 293–297, 1951.

YANG, Y.; CHENG, Y. M. “A fractal model of contact force distribution and the

unified coordination distribution for crushable granular materials under confined compression”. *Powder Technology*, v. 279, p. 1–9, 2015.

YOON, J. “Application of experimental design and optimization to PFC model calibration in uniaxial compression simulation”. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v. 44, n. 6, p. 871–889, 2007.

ZHOU, Y. C.; WRIGHT, B. D.; YANG, R. Y.; *et al.*, “Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation”. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. v. 269, p. 536–553, 1999.

ZHOU, Y. C.; XU, B. H.; YU, A. B.; *et al.*, “An experimental and numerical study of the angle of repose of coarse spheres”. *Powder technology*. v. 125, p. 45–54, 2002.

ZHU, H. P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; *et al.*, “Discrete particle simulation of particulate systems : Theoretical developments”. *Chemical Engineering Science*. v. 62, p. 3378–3396, 2007.

ZHU, H. P.; ZHOU, Z.Y.; YANG, R.Y.; *et al.*, “Discrete particle simulation of particulate systems : A review of major applications and findings”. *Chemical Engineering Science*. v. 63, p. 5728–5770, 2008.

ANEXO A

CONSIDERAÇÕES DO PARÂMETRO TAMANHO MÍNIMO LIMITE - $\phi_{l,p}$ NO MODELO PRM-V3 (EDEM)

Na avaliação teórica da modelagem da progênie, tal como definida na Tabela 4.7 (Capítulo 3), foi considerado que existe uma perda de massa associada na substituição (quebra), a qual corresponde aproximadamente ao 7 % da massa inicial. Posteriormente, na quebra subsequente a perda de massa incrementaria uma porcentagem em relação a cada fragmento da quebra primaria, ou seja, cada partícula na substituição perderia 7% da sua massa, e seria acumulada uma porcentagem maior ao 7 %, em relação a massa inicial, tal como se ilustra na Figura a.1. Nesta, se apresenta por meio de duas curvas a porcentagem de massa quebrada, e a correspondente porcentagem acumulado de massa perdida em relação à massa inicial para cada evento de quebra de uma partícula individual e os seus fragmentos, subsequentemente. De forma geral se evidencia que quanto mais massa quebrada, maior é a perda. Do mesmo modo, quanto mais processos subsequentes de quebra mais acumulo de massa perdida, no entanto, a definição de um tamanho limite restringe o processo de perda de massa. Vale ressaltar que os valores mostrados na Figura a.1, são correspondentes a versão do PRM usada aqui, assim como as partículas usadas para a modelagem da progênie na presente pesquisa, com as quais se considera 7% de perda de massa.

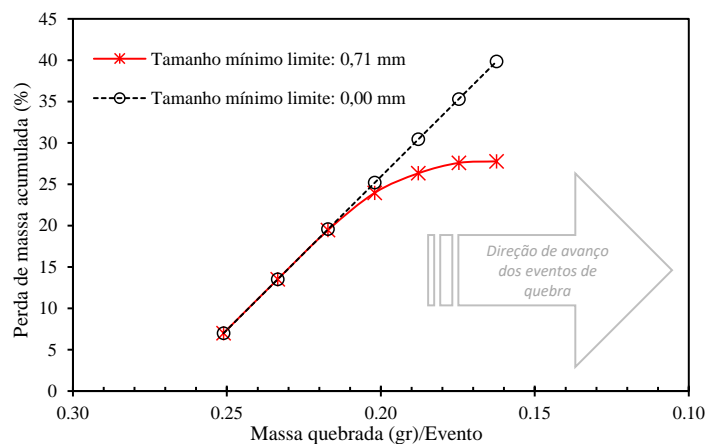


Figura a.1: Taxa de perda de massa por massa quebrada nos eventos de quebra subsequente na versão do PRM – V3 (EDEM).

A definição do tamanho mínimo limite é feita visando ganhos computacionais, se evitando a criação de elevados números de partículas da progênie. Embora exista um

ganho computacional, mediante isto é sacrificado a resolução da quebra e a representação de finos, no entanto, a sua correta eleição pode favorecer também na conservação da massa numa determinada rotina de PRM. Vale ressaltar que a avaliação das versões do PRM desenvolvidas por BARRIOS *et al.* (2015) está fora do escopo do presente trabalho.

ANEXO B

TABELAS PADRÃO DE FRAGMENTAÇÃO DA PROPOSTA DO MODELO DE QUEBRA AVANÇADO, BASEADO NO PRM

Tabela b.1. Tabela padrão para 1 kWh/t

Razão do tamanho	Distribuição experimental	Número de partículas						Total
		d1b	d2b	d3b	d4b	d5b	d6b	
1	0	0	0	0	0	0	0	0
0,84	0,35	0	0	0	0	0	0	0
0,71	0,57	1	0	0	0	0	0	1
0,59	3,92	1	2	1	0	0	0	4
0,50	5,62	1	1	1	1	1	0	5
0,42	8,53	1	1	2	3	1	1	9
0,35	12,11	2	3	3	2	1	1	12
0,30	20,11	1	2	4	6	6	1	20
0,25	27,64	2	2	3	6	6	8	27
0,21	27,62	1	2	3	6	6	9	27
0,18	40,28	1	2	3	7	8	19	40
0,15	46,36	1	1	3	9	15	17	46
0,13	664,60	37	67	91	96	182	249	722
Total	857,73	49	83	114	136	226	305	913

Tabela b.2. Tabela padrão para 0,25 kWh/t

Razão do tamanho	Distribuição experimental	Número de partículas											Total
		d1c	d2c	d3c	d4c	d5c	d6c	d7c	d8c	d9c	d10c	d11c	
1	1,23	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0,84	4,93	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	5
0,71	5,80	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	6
0,59	5,88	0	0	0	0	0	0	1	2	2	0	1	6
0,50	7,34	0	1	0	0	0	0	2	0	1	1	2	7
0,42	5,99	0	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	6
0,35	8,37	0	1	1	1	0	0	1	1	0	1	2	8
0,30	12,64	0	1	1	2	1	0	1	1	0	2	4	13
0,25	17,38	0	1	1	2	1	0	1	1	0	4	6	17
0,21	19,43	0	1	1	2	0	1	1	3	0	4	6	19
0,18	27,83	0	1	1	3	0	1	1	5	1	6	9	28
0,15	22,64	0	1	3	4	0	2	1	6	1	2	3	23
0,13	413,47	0	52	113	79	5	16	42	33	9	108	32	489
Total	552,93	1	61	123	95	9	22	52	53	16	130	66	628